

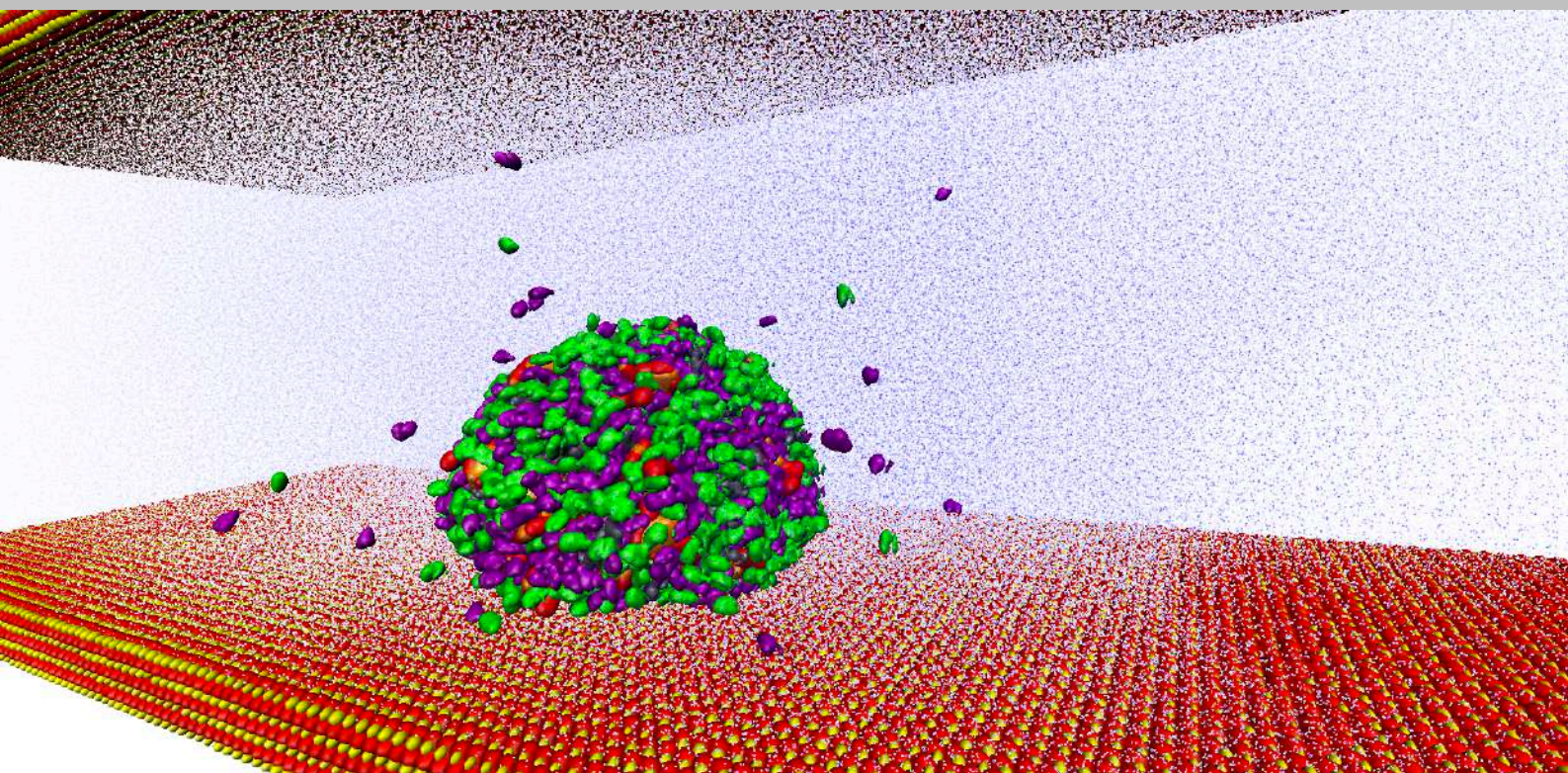


Institut de Química Teòrica  
i Computacional  
UNIVERSITAT DE BARCELONA



UNIVERSITAT DE  
BARCELONA

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



Memòria d'activitats 2016



La creació de l' Institut de Química Teòrica i Computacional de la Universitat de Barcelona (IQTCUB) va ser aprovada al 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 ha estat un altre any difícil per a la recerca a Espanya i el suport institucional de la Universitat de Barcelona a través del Vicerectorat de Recerca ha estat crucial i 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 tot i mostrant un impacte creixent en la seva activitat científica. Aquest any ha estat marcat també per les eleccions al Rectorat de la UB i esperem que, a la vista d'aquesta memòria, el nou equip renovi la confiança en l' IQTCUB i poder continuar rebent el suport de la nostra universitat en els propers anys, suport necessari per tal de mantenir el nivell científic de l' IQTCUB, un nivell científic elevat que va ser reconegut en una avaluació externa recent.

A handwritten signature in blue ink, consisting of several overlapping loops and lines, characteristic of the signature of Francesc Illas.

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	9
I.5 Equipaments	10
II. ACTIVITATS DE L'IQTCUB .....	21
II.1 Activitats de tipus general (cursos, beques i divulgació)	21
II.2 Seminaris i conferències de l'IQTCUB	31
II.3 Investigadors convidats per l'IQTCUB	33
III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB .....	35
III.1 Resultats més rellevants	35
III.2 Llista de publicacions	55
Articles publicats	55
Capítols de llibres i proceedings	69
III.3 Altres activitats	71
Tesis doctorals	71
Màsters	71
Participació a congressos	75
Estades en centres externs	91
Participació en projectes d'investigació	93



## I. DESCRIPCIÓ DE L'IQTCUB

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

### I.1 EQUIP DIRECTIU

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

## I.2 LÍNIES DE RECERCA DEL IQTCUB

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

### 1. Desenvolupament de mètodes, algorismes i eines computacionals

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

### 2. Ciència dels materials computacional

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

### 3. Bioquímica computacional i *soft matter*

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

### 4. Reactivitat i dinàmica de reaccions

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

### I.3 MEMBRES DE L'IQTCUB

L'IQTCUB està constituït per un total de 96 docents/investigadors. A continuació es mostra la llista completa de membres indicant la seva categoria acadèmica i el departament i secció de la UB al qual pertanyen.

<b>Cognoms</b>	<b>Nom</b>	<b>Departament/Unitat</b>	<b>Secció</b>
<b>Catedràtics</b>			
Aguilar Navarro	Antonio	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Alemany i Cahner	Pere	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Alvarez Reverter	Santiago	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Bofill Villà	Josep Maria	Química Inorgànica i Orgànica	Química Orgànica
González Pérez	Miguel	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Illas Riera	Francesc	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Mas Pujadas	Francesc	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Novoa Vide	Juan José	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Rubio Martínez	Jaime	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Ruiz Sabin	Eliseo	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Sayós Ortega	Ramón	Ciència de Materials i Química Física	Química Física

#### **Professors Titulars**

Albertí Wirsing	Margarita	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Costa Sala	Ramón	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
De Andrés Llopis	Jaime	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
D. P. Ribeiro Moreira	Ibério	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Giménez Font	Xavier	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Huarte Larrañaga	Fermín	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Lucas Alcorta	Josep Maria	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Llunell Marí	Miquel	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Mota Valeri	Fernando	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Paniagua Valle	Juan Carlos	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Solé Sabaté	Albert	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Sousa Romero	Carme	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Vilaseca Font	Eudald	Ciència de Materials i Química Física	Química Física



**Professors Agregats**

Aullón López	Gabriel	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Bonet Ruiz	Jordi	Enginyeria Química i Química Analítica	Enginyeria Química
Deumal Solé	Mercè	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Díez Pérez	Ismael	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Gamallo Belmonte	Pablo	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Madurga Díez	Sergio	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Ribas Ariño	Jordi	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Reigada Sanz	Ramón	Ciència de Materials i Química Física	Química Física

**Professors Associats**

Figueras Valls	Marc	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Jover Modrego	Jesús	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Roncero Barrero	Cristina	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Tercero Mohedano	Javier	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Valero Montero	Rosendo	Ciència de Materials i Química Física	Química Física

**Professors d'Investigació ICREA**

Bromley	Stefan T.	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Neyman	Konstantin M.	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Poater Teixidor	Jordi	Química Inorgànica i Orgànica	Química Orgànica
Rovira Virgili	Carme	Química Inorgànica i Orgànica	Química Orgànica

**Investigadors Postdoctorals**

*Beatriu de Pinós-Juan de la Cierva*

Cirera Fernández	Jordi	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Echeverría López	Jorge	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Albareda Piquer	Guillem	IQTCUB	

*Marie-Curie*

Darwish	Nadim	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
---------	-------	---------------------------------------	----------------

*Ramón y Cajal*

Viñes Solana	Francesc	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
--------------	----------	---------------------------------------	----------------

*Contracte Projecte de Recerca*

Bahamón	Daniel	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
López Marne	Estefanía	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Valero Montero	Rosendo	Ciència de Materials i Química Física	Química Física

*Altres*

Alfonso Prieto	Mercedes	Química Inorgànica i Orgànica	Química Orgànica
Chul Ko	Kyoung	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Hjorth Larsen	Ask	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Kovács	Gábor	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Vilà Casanova	Arnau	Ciència de Materials i Química Física	Química Física

**Investigadors Predoctorals***Beca CONICYT*

Maxwell Villacorta	Lindley	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
--------------------	---------	-------------------------------	--------------------

*Beca FI*

Prats García	Hèctor	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
--------------	--------	---------------------------------------	----------------

*Beca FPI*

Alonso Gil	Santiago	Química Inorgànica i Orgànica	Química Orgànica
Climent Biescas	Clàudia	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Coinés López-Nieto	Joan	Química Inorgànica i Orgànica	Química Orgànica
Falceto Palacín	Andrés	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Jurado Sáez	Manuel	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
López Carrasco	Montse	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Posada Pérez	Sergio	Ciència de Materials i Química Física	Química Física

*Beca FPU*

Alcon Rovira	Isaac	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Amoza Dávila	Martín	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Cortijos Aragones	Albert	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Garrido Sagargazu	Eduardo	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Mondelo Martell	Manel	Ciència de Materials i Química Física	Química Física

*Beca ITN UE*

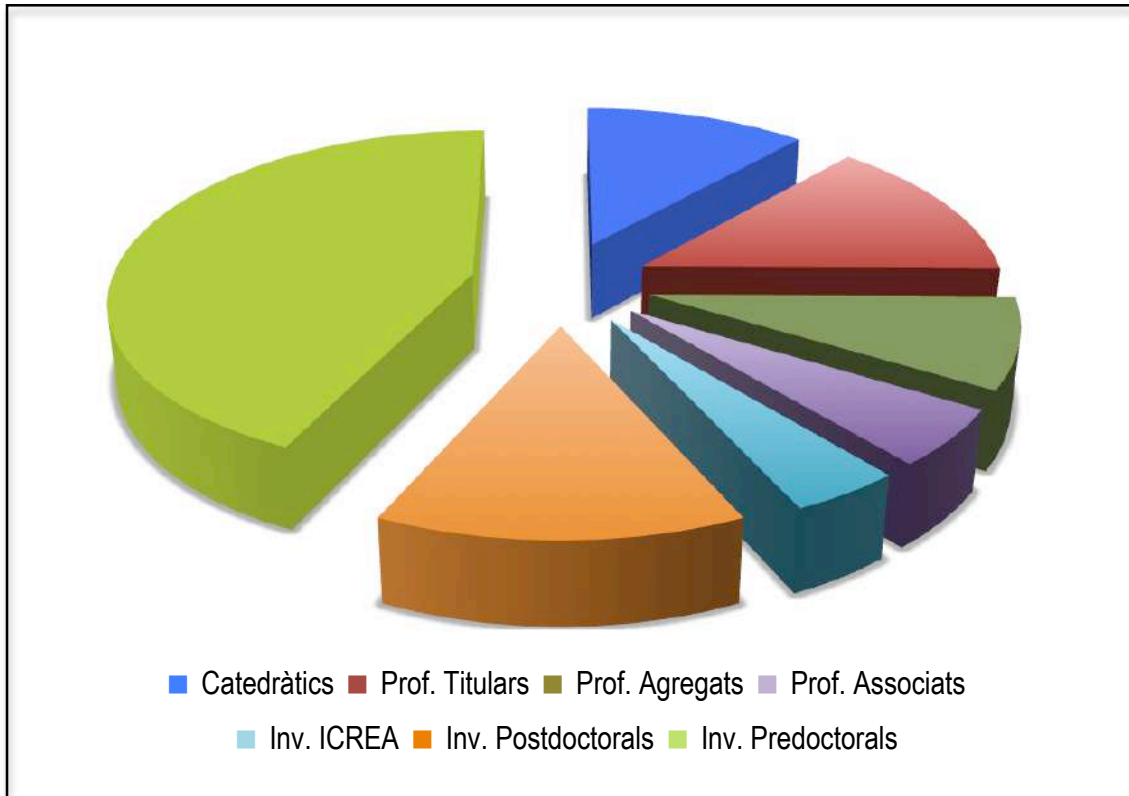
Francesse	Tommaso	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
-----------	---------	---------------------------------------	----------------

*Beca UB / ADR*

Alonso Benito	Gerard	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Blancafort Jorquera	Miquel	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Lamiel Garcia	J. Oriol	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Macià Escatllar	Antoni	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Raich Armendáriz	Lluís	Química Inorgànica i Orgànica	Química Orgànica

*Altres*

Balcells Nadal	Cristina	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Bernuz Fitó	Efrem	Química Inorgànica i Orgànica	Química Orgànica
Blanco Andrés	Pablo Miguel	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Cuko	Andi	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
De Moya	Natalia	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Figueroba Sánchez	Alberto	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Keshavarz	Sarah	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Kunkel	Christian	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Manadé Company	Montserrat	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Martín Rodríguez	Alejandro	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Millán Alvares	Maria Angeles	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Muñoz Galán	Helena	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Nin Hill	Alba	Química Inorgànica i Orgànica	Química Orgànica
Omidvar	Akbar	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Piñero Vargas	Juan José	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Pozuelo Ruiz	Marta	Institut de Bioenginyeria de Catalunya	
Pueyo Bellafont	Noelia	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Reta Mañeru	Daniel	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Sopena Moros	Arturo	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Vega Domínguez	Lorena	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Vilaplana Saiz	Marta	Ciència de Materials i Química Física	Química Física



Distribució de membres docents/investigadors de l'IQTCUB segons la 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**  
**Teresa Arenal Porcel**

*Responsable de sistemes*  
*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 dos sales condicionades dins la facultat de Física i Química. L'espai destinat a tots els clúster de càlcul es troba refrigerat per dues màquines d'aire condicionat de 44.000 i 66.000 frigories, respectivament. En el cas de l'iqtc06 i iqtc07 es troben a un altre espai refrigerat per una màquina d'aire condicionat de 30.000 frigories y dos de 9000 frigories.

### CLÚSTERS DE CÀLCUL

**cerqt2** (valor invertit 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 màster 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 invertit 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 invertit 78.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster HP
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES10.
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul.
<i>Estructura</i>	26 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	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 invertit 33.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster HP
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES10.
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul.
<i>Estructura</i>	11 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Tots els processadors són de 64 bits. Forma part del clúster 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 invertit 460.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster HP
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES11.
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul.
<i>Estructura</i>	101 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	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 càlcul)

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 càlcul)

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 càlcul)

Xarxa d'administració ILO

**iqtc05** (valor invertit 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 invertit 420.000 €)

*Tipus de màquina* Clúster heterogeni

*Sistema Operatiu* SLES11.

*Serveis* Clúster de càlcul.

*Estructura* 32 nodes en clúster

*Comentaris* Tots els processadors són de 64 bits

*Especificacions:*

**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 càlcul)

Xarxa d'administració ILO

**7 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 càlcul)

Xarxa d'administració IPMI

**iqtc07** (valor invertit 40.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster Supermicro
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES12
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul
<i>Estructura</i>	2 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Tots els processadors son de 64 bits
<i>Especificacions:</i>	

**2 nodes Supermicro 2048U RT4**

CPU: 4 x2.6GHZ Intel Broadwell 10Core

RAM: 512GB or 1TB

HD: 1x1TB

Xarxa: 4 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa: 2 targetes 10GB (xarxa càlcul)

Xarxa d'administració ILO

**Clúster GPU** (valor invertit 47.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster heterogeni
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES11, centos 7
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul amb GPU
<i>Estructura</i>	5 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Tots els processadors son de 64 bits

*Especificacions:***Node**

CPU: 1 Intel Core i7 950 3,06GHZ

RAM: 16GB

HD: 1 disc de 1TB (Sistema operatiu)

Xarxa: 1 targeta 100/1000 xarxa interna

GPU: 1 NVIDIA GTX580, 1 NVIDIA GTX480

**Node INTEL Tyan FT72B7015**

CPU: 2 Xeon SixCore 2,66GHZ  
RAM: 48GB  
HD: 1 disc dur de 500GB  
Xarxa: 4 targetes 100/1000 (xarxa interna)  
Xarxa d'administració IPMI  
GPU: 8 NVIDIA GTX580

**Node**

CPU: 1 AMD FX-4100 QuadCore 3,30GHZ  
RAM: 16GB  
HD: 1 disc dur de 1TB  
Xarxa: 1 targeta 100/1000 (xarxa interna)  
GPU: 1 NVIDIA GTX770

**Node INTEL ASUS ESC4000 G2**

CPU: 2 Xeon SixCore 2GHZ  
RAM: 32GB  
HD: 1 disc dur de 2TB  
Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)  
Xarxa d'administració IPMI  
GPU: 4 NVIDIA GTX TITAN

**Node INTEL ASUS ESC4000 G2**

CPU: 2 Xeon SixCore 2.4GHZ  
RAM: 32GB  
HD: 1 disc dur de 1TB  
Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)  
Xarxa d'administració IPMI  
GPU: 4 NVIDIA GTX TITAN BLACK

**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

**Node SIE LADON BROADWELL**

CPU: 8 Xeon E5-2640v4 2'4Ghz  
RAM: 128GB  
HD: 1 disc dur de 1TB  
Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)  
Xarxa d'administració IPMI  
GPU: 2 NVIDIA TESLA K40

## SERVIDORS

---

### Servidors de discos glusterfs (valor invertit 30.000 €)

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

#### *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

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster HP
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES 11
<i>Serveis</i>	Clúster de discos formant 32TB de disc per exportar mitjançant GlusterFS les dades d'usuari a tots els clústers
<i>Estructura</i>	2 nodes
<i>Comentaris</i>	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 invertit 2.300 €*)

<i>Tipus de màquina</i>	2 màquines redundants HP ProLiant DL120 G5
<i>Sistema Operatiu</i>	Debian stable
<i>Serveis</i>	SGE Execution Host, Heartbeat, ssh server
<i>Estructura</i>	2 nodes redundants
<i>Comentaris</i>	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 invertit 18.300 €*)

<i>Tipus de màquina</i>	4 màquines redundants
<i>Sistema Operatiu</i>	Debian stable
<i>Serveis</i>	Xenha i tots els serveis virtuals ofertats a l'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 invertit 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.

1. Màquina Backup DELL R515 (màquina de backup amb 4TB de disc i un SAI de suport).
2. Màquina cintes HP MSL4048 (màquina de cintes amb 48 cintes amb capacitat aproximada de 1TB/cinta).
3. Màquina d'administració (pc amb 3 targetes de xarxa per suport a incidències crítiques).
4. Màquina proxy (servidor que dona sortida a la xarxa pública des de la xarxa de l'iqtcub).
5. Switch Layer 3 HP Procurve de 24 ports (dona cobertura a tota la infraestructura dels CPD del IQTCUB).
6. 8 Switchs Layer 2 Dlink de 48 ports (xarxa interna clústers cerqt2, iqtc01, iqtc02, iqtc03).
7. 4 Switchs Layer 2 HP de 48 ports (xarxa interna clúster iqtc04, iqtc05 i iqtc06).
8. 3 Switchs Infiniband Voltaire de 36 ports (xarxa càlcul iqtc04).

9. Switch moduable HP (8 mòduls per xarxa interna clúster iqt01,iqt02,iqt03).
10. 2 Switchs modulables HP 10GB (xarxa interna clúster iqt06 i servidors de fitxers)

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

## RESUM DEL POTENCIAL DE CÀLCUL

---

Cores ..... 3406 c

Memòria ..... 24.736 GB RAM

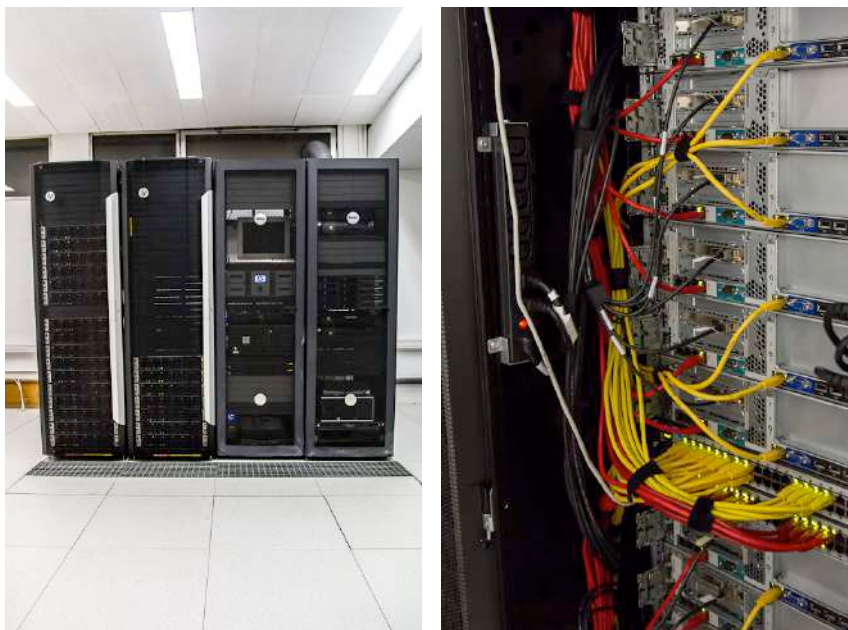
Discs de Càlcul ..... 178 TB

Discs d'Usuari ..... 32 TB

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

*1.863.000 €\**

\*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 2016.

- a. **Promoció i incentivació a la recerca.** Enguany l'IQTCUB ha concedit tres *Ajuts d'iniciació a la recerca* consistent en un contracte personal per un valor aproximat de 2.000 €. 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. Els ajuts han estat concedits als estudiants Lorena Vega Domínguez, Xavier Marugán Ferrer i Enrique Fortín Foz, per iniciar el màster corresponent sota la direcció dels Drs. Francesc Vinyes, Pere Alemany i Francesc Mas, respectivament.

*Despesa associada: 6.246 €*



Anunci dels ajuts d'iniciació a la recerca de l'IQTCUB d'enguany.



- b. **7<sup>a</sup> Jornada de l'IQTCUB.** El 10 de Juny de 2016 tingué lloc la setena edició d'aquesta Jornada de divulgació científica organitzada per la Dra. Mercè Deumal i el Dr. Jordi Cirera. En aquesta jornada membres de l'IQTCUB i d'altres conferencians de reconegut prestigi internacional exposaren els seus treballs més recents. En l'edició d'enguany destacà la participació del Prof. Walter Thiel del Max-Planck-Institut für Kohlenforschung amb la conferència titulada *Surface-hopping excited-state dynamics*, el Dr. Jorge Echeverría (*Single molecule motors working on surfaces*), Dr. Rosendo Valero (*Nomad, the novel materials discovery laboratory*), Dr. Gábor Kovács (*Versatile optimization of Chemical ordering in bimetallic nanoparticles*) i Lluís Raich (*Thiolate-protected gold nanoparticles: structural properties and reactivity*) de la Universitat de Barcelona i l'IQTCUB, i la Dra. Anna Paola Migani de l'Institut Català de Nanociència i Nanotecnologia (*Theoretical study of heterogeneous photo-catalysis*). A més a més es presentaren 19 contribucions en format pòster. Les despeses totals de la Jornada es corresponen al cost del transport i l'estada del Prof. Walter Thiel, del transport de la Dra. Anna Paola Migani i del servei de càtering ofert a tots assistents.

Despesa pressupostada: 1.503 €

**VII Jornada iqtCUB**  
**Química Teòrica i Computacional**  
Auditori Enric Casassas, 10 de juny, 9.30h

**Vine a conèixer-nos!**

The poster features several scientific diagrams: 1. Nanoparticles: Spheres labeled  $Pt_{20}Au_{20}$ ,  $Pt_{20}Au_{10}$ ,  $Pt_{20}Au_{5}$ , and  $Pt_{20}Au_{15}$ . 2. Functionalization: A diagram showing a nanoparticle being functionalized with a ligand (L) to form a 'Functionalized' state, with a 'Typical' state and 'Recombination' also indicated. 3. Materials Science: A circular diagram titled 'MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING' with 'LEADER MATERIALS DISCOVERY' in the center, surrounded by 'NEWS SERVICES' and 'SCIENTIFIC PUBLICATIONS'. 4. Molecular Structure: A diagram of a 'glutathione' molecule with labels for 'Glu', 'Cys', and 'Gly'. 5. Photo-catalysis: A diagram showing a 'TiO<sub>2</sub>' nanoparticle with 'CH<sub>3</sub>OH' molecules. It illustrates '1. Photon Absorption', '2. Charge Carriers Separation', and '3. Electron Transfer Photo-oxidation'.

Anunci de la 7<sup>a</sup> Jornada de l'IQTCUB.

c. **6è Curs d'Introducció a la Química Computacional.** L'objectiu principal del curs organitzat pels Profs. Fermín Huarte i J. Carlos Paniagua del Departament de Ciència de Materials i Química Física i membres de l'IQTCUB, 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 sisena edició amb un gran èxit de participació, rebent més de 40 sol·licituds d'inscripció. Els diferents temes s'han cobert per docents vinculats al IQTCUB en sessions de dues hores i en aquest 2016 han estat:

1. *Introducció al Linux*, Oriol Lamiel i Gerard Alonso (UB, IQTCUB).
2. *Visualització de Biomolècules*, Drs. Carme Rovira i Mercedes Alfonso (UB, IQTCUB).
3. *Programació estructurada*, Profs. Albert Solé, Fermín Huarte i J. Carlos Paniagua (UB, IQTCUB).
4. *Autòmata cel·lular*, Prof. Miquel Llunell i Clàudia Climent (UB, IQTCUB).
5. *Simulació de la difusió mitjançant tècniques Monte Carlo*, Prof. Sergio Madurga (UB, IQTCUB).
6. *Modelat de materials per ordinador*, Dr. Stefan Bromley (UB, IQTC).
7. *Anàlisi de propietats moleculars mitjançant eines de Química Computacional*, Prof. Gabriel Aullón (UB, IQTCUB).
8. *Fortran 90*, Prof. Miquel Llunell (UB, IQTCUB).

En aquesta edició, celebrada del 27 de Juny a l'1 de Juliol, s'hi han inscrit 24 alumnes: V. Advíncula, R. Beato, J. Caldentey, M. Camats, A. Cardenal, R. Cardoso, Z. Fazio, M. Fernández, A. Garcia, P. Lozano, J. Mariñoso, B. Martínez, A. Miró, R. Morales, S. Rafael, M. Ribas, R. Saez, I. Sánchez, R. Terricabres, A. Torres, P. J. Tortajada, S. Trujillo, D. Vázquez i L. Villar.

Despesa pressupostada: 250 €



Institut de química teòrica  
i computacional de la UB

**iqtc**

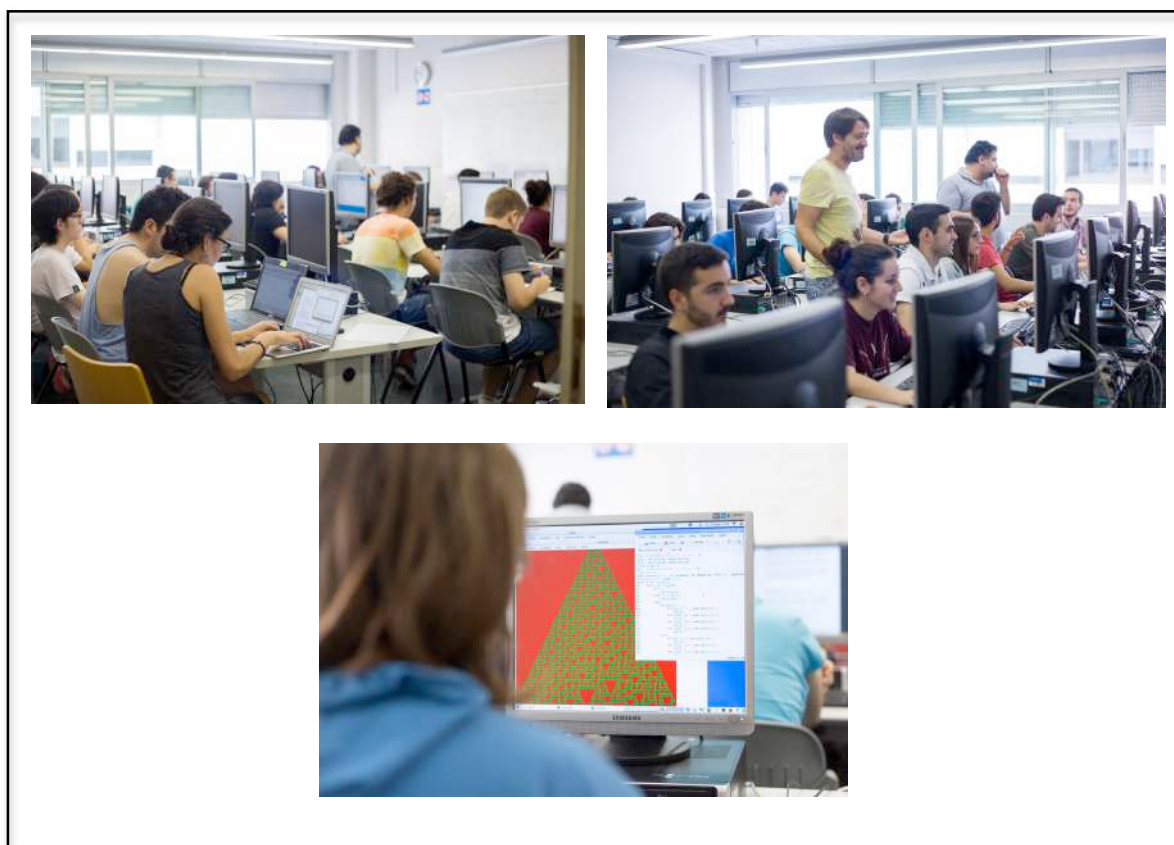
U  
B

**CURS D'INTRODUCCIÓ A LA  
QUÍMICA COMPUTACIONAL**

- 27/06 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](http://www.iqtc.ub.es/Curs_IQC)

Anunci del 6<sup>è</sup> Curs d'Introducció a la Química Computacional celebrat enguany.



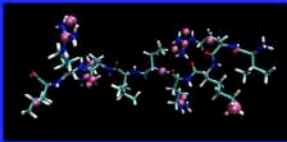
Fotografies realitzades a les sessions del Curs d'Introducció a la Química Computacional d'enguany.

- d. **5<sup>e</sup> 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 la cinquena edició del *Curs Avançat de Química Computacional* organitzat per els Profs. Jaime Rubio i Miguel González amb l'objectiu d'ampliar els coneixements d'informàtica aplicada a la química computacional adquirits prèviament. El curs s'ha celebrat del 4 al 8 de Juliol i ha estat adreçat principalment als alumnes que ja haguessin assistit prèviament al curs d'*Introducció a la Química Computacional* o a estudiants que haguessin assistit a un curs de Química Quàntica. Els estudiants inscrits en aquest curs van ser 15: B. Oró, E. Boldú, M. Camats, B. Martínez, J. Mariñoso, A. Pla, J. Dalmau, M. Garçon, M. Ribas, A. Garcia, C. Privat, J. Bonet, D. Vidal, M. Delgà i J. Sans. L'IQTCUB ha cobert les despeses d'esmorzar de tots els participants.

*Despesa pressupostada: 240 €*

En sessions de dues hores s'han tractat els temes que es detallen a continuació juntament amb els docents que han impartit les sessions:

1. *Disseny de fàrmacs*, Prof. Jaime Rubio (UB, IQTCUB).
2. *Reaccions en fase gas: dinàmica i cinètica*, Profs. Miguel Gonzalez i Pablo Gamallo (UB, IQTCUB).
3. *Simulacions de Monte Carlo Cinètic en catàlisi heterogènia*, Prof. Ramon Sayós i Hèctor Prats (UB, IQTCUB).
4. *Reaccions enzimàtiques: QM/MM*, Prof. Rodrigo Martínez Ruiz (Universidad de La Rioja).
5. *Estats excitats*, Prof. Mercè Deumal (UB, IQTCUB).
6. *Introducció SGE*, Jordi Inglés i Teresa Arenal (*tècnics informàtics IQTCUB*).
7. *Estat sòlid*, Profs. Iberio Ribeiro i Miquel Llunell (UB, IQTCUB).
8. *Fortran 90*, Prof. Miquel Llunell (UB, IQTCUB).



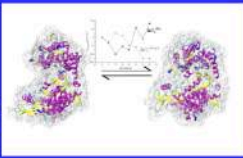
Institut de química teòrica  
i computacional de la UB



**V CURS AVANÇAT DE QUÍMICA  
COMPUTACIONAL**

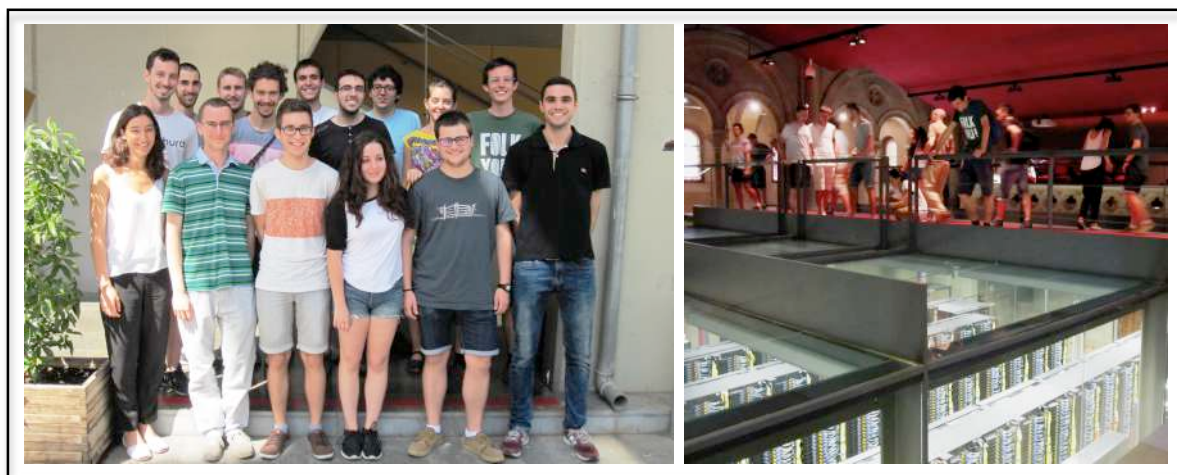


- 4 al 8 de juliol matins de 9:00 a 13:30
- 25 places
- aprofundiment en Linux,
- programació, eines de la QC



info & inscripció: <http://www.iqtc.ub.es/cursAQC>

Anunci del 5<sup>è</sup> Curs Avançat de Química Computacional celebrat enguany.



Fotografies amb els alumnes que han realitzat el *Curs Avançat de Química Computacional* d'enguany i durant la visita a la sala del Mare Nostrum (BSC).

e. **Seminaris interns de l'IQTC.** En el mes d'abril s'han engegat aquests seminaris periòdics per tal de divulgar les diferents línies de recerca que té l'IQTC. Els organitzadors d'aquestes jornades són els estudiants de doctorat Isaac Alcón i Manel Mondelo juntament amb el Prof. Francesc Illas, tots tres vinculats tant al IQTCUB com al Departament de Ciència de Materials i Química Física de la Universitat de Barcelona. A continuació detallem els seminaris que s'han impartit en el transcurs de l'any 2016:

1. *Towards a first principles description of realistic models of TiO<sub>2</sub> nanoparticles.*  
Oriol Lamiel, 29 abril 2016.
2. *Twist is all you need.*  
Isaac Alcón, 29 abril 2016.
3. *Catalysts for green chemistry.*  
Sergi Posada, 17 juny 2016.
4. *How does the coordination affect the low lying minima in inorganic clusters.*  
Andy Cuko, 17 juny 2016.
5. *About a pedagogical approach to DFT.*  
Prof. J. Carlos Paniagua, 15 juliol 2016.
6. *Time-scale separation of confined and free motions in the H @ SWNT system.*  
Manel Mondelo, 14 octubre 2016.
7. *Reactivity insights inside the amylosucrase. When occurs the polymerization?*  
Santiago Alonso, 14 octubre 2016.
8. *On the existence of Pt<sup>4+</sup> in cerium dioxide: born by nanostructuring.*  
Alberto Figueroba, 18 novembre 2016.
9. *First-principles theoretical studies on the mechanism of bistability in molecule-based magnets.*  
Tomaso Francese, 18 novembre 2016.

f. **Activitats de divulgació científica.** El Prof. Xavier Giménez Font manté un blog de divulgació a la revista *Investigación y Ciencia* sota el títol *Química, Aire y Ambiente* on es fa menció sovint de l'activitat i novetats de la recerca efectuada a l'IQTCUB. Durant l'any 2016 s'han publicat els següents articles:

1. *Del caos a la energia sostenible: dióxido de carbono, metano y lagos volcánicos.*  
(<http://www.investigacionyciencia.es/blogs/fisica-y-quimica/39/posts/del-caos-a-la-energa-sostenible-dixido-de-carbono-metano-y-lagos-volcnicos-14036>)
2. *Acerca de la magia del agua y de algunos magos de la palabra.*  
(<http://www.investigacionyciencia.es/blogs/fisica-y-quimica/39/posts/acerca-de-la-magia-del-agua-y-de-algunos-magos-de-la-palabra-14098>)
3. *Saber: enseñar casi sin clases magistrales: (1) atrevámonos.*  
(<http://www.investigacionyciencia.es/blogs/fisica-y-quimica/39/posts/acerca-de-la-magia-del-agua-y-de-algunos-magos-de-la-palabra-14098>)
4. *Saber: enseñar casi sin clases magistrales: (2) hagámoslo.*  
(<http://www.investigacionyciencia.es/blogs/fisica-y-quimica/39/posts/s-a-b-e-r-ensear-casi-sin-clases-magistrales-ii-hagmoslo-14170>)
5. *El ozono se recupera, el calentamiento global continua.*  
(<http://www.investigacionyciencia.es/blogs/fisica-y-quimica/39/posts/el-ozono-se-recupera-el-calentamiento-global-contina-14346>)
6. *¿Agua embotellada o agua del grifo?*  
(<http://www.investigacionyciencia.es/blogs/fisica-y-quimica/39/posts/agua-embotellada-o-agua-del-grifo-14442>)
7. *Y se hace la luz: (1) la grandiosidad cósmica.*  
(<http://www.investigacionyciencia.es/blogs/fisica-y-quimica/39/posts/y-se-hace-la-luz-i-la-grandiosidad-csmica-14791>)

8. *Y se hace la luz: (2) qué es el fuego y otras sutilezas naturales.*  
(<http://www.investigacionyciencia.es/blogs/fisica-y-quimica/39/posts/y-se-hace-la-luz-ii-qu-es-el-fuego-y-otras-sutilezas-naturales-14886>)





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

El Dr. Stefan Bromley ha continuat organitzant els seminaris i conferències de l'IQTCUB d'enguany. Un total de deu seminaris i/o conferències que es detallen a continuació:

1. **Dr. Martin Goethe** (Universitat de Barcelona) Espanya.  
*Correcting free energy expressions for thermal motion.*  
4 febrer 2016.
2. **Prof. Bern Ensing** (Van't Hoff Institute for Molecular Sciences, University of Amsterdam) Holanda.  
*First principle molecular dynamics simulations of electron transfer between aqueous solutes and in photoactive proteins.*  
16 febrer 2016.
3. **Dr. Jordi Poater** (Dept. Química Orgànica, Universitat de Barcelona) Espanya.  
*B-DNA structure and stability & silylenes stability and reactivity through DFT bonding analyses.*  
6 abril 2016.
4. **Prof. Aron Walsh** (University of Bath) Regne Unit.  
*Solar energy with a twist: dynamic disorder in hybrid perovskites.*  
22 abril 2016.
5. **Prof. Célia Fonseca** (Vrije Universiteit Amsterdam) Holanda.  
*The role of aromaticity, hybridization, electrostatics and covalency in resonance-assisted hydrogen bonds.*  
25 abril 2016.

6. **Dante Alexander Morales** (Universidad Católica de Santa María de Arequipa) Perú.  
*Ciclótidos (Rubiaceae) frente a enfermedades neurodegenerativas.*  
21 juliol 2016.
  
7. **Prof. Sergi Garcia-Manyes** (Kings College London) Regne Unit.  
*Linking mechanochemistry to protein folding at the single bond level.*  
7 novembre 2016.
  
8. **Dr. Jocelyne Vreede** (Van't Hoff Institute for Molecular Sciences, University of Amsterdam) Holanda.  
*Path sampling simulations of the mechanisms and rates of transitions between Watson-Crick and Hoogsteen base pairing in DNA.*  
11 novembre 2016.
  
9. **Dr. Ivano Tavernelli** (Zürich Research Laboratory) Suïssa.  
*TDDFT-based nonadiabatic dynamics with relativistic effects.*  
17 novembre 2016.
  
10. **Prof. Nadia Balucani** (University of Perugia) Itàlia.  
*Gas-phase chemistry in extraterrestrial environments.*  
15 desembre 2016.

## II.3 INVESTIGADORS CONVIDATS PER L'IQTCUB

Durant el 2016, l'IQTCUB ha acollit un total de quinze visites temporals d'investigadors externs.

1. **Dr. Angel Morales** (visitant convidat).  
Charles University, República Txeca.  
Octubre 2016.
2. **Prof. Ichraf Oueslati** (visitant COST).  
Universitat de Paris, França.  
Març 2016.
3. **Prof. Ivano Tavernelli** (visitant convidat).  
IBM Zürich Research Laboratory, Suïssa.  
Novembre 2016.
4. **Dr. Aaron Kelly** (visitant convidat).  
Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter, Alemanya.  
Novembre 2016.
5. **Dra. Noelia Faginas** (visitant convidat).  
Università di Perugia, Itàlia.  
Setembre 2016.
6. **Prof. Andrea Lombardi** (visitant convidat).  
Università di Perugia, Itàlia.  
Setembre 2016.
7. **Dante Alexander Morales** (visitant convidat).  
Universidad Católica de Santa María de Arequipa, Perú.  
Juliol-agost 2016.

8. **Diego Ernesto Valencia** (visitant convidat).  
Universidad Católica de Santa María de Arequipa, Perú.  
Octubre 2016.
  
9. **Haruna Luz Barazorda** (visitant convidat).  
Universidad Católica de Santa María de Arequipa, Perú.  
Octubre 2016.
  
10. **Dr. Miroslava Nedyalkova** (Materials networking European project).  
University of Sofia, Bulgària.  
Novembre 2016.
  
11. **Prof. Hristiyan Alesandrov** (visitant convidat).  
University of Sofia, Bulgària.  
Gener-febrer, juliol-setembre 2016.
  
12. **Prof. Jorge Pavez** (visitant convidat).  
Universitat de Santiago de Chile, Xile.  
Novembre 2016.
  
13. **Prof. Ingrid Ponce** (visitant convidat).  
Universitat de Santiago de Chile, Xile.  
Setembre 2016.
  
14. **Javier Espinoza** (visitant convidat).  
Universitat de Santiago de Chile, Xile.  
Setembre 2016.
  
15. **Prof. Nadia Balucani** (visitant convidat).  
University of Perugia, Itàlia.  
Desembre 2016.

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

### III.1 RESULTATS MÉS RELLEVANTS

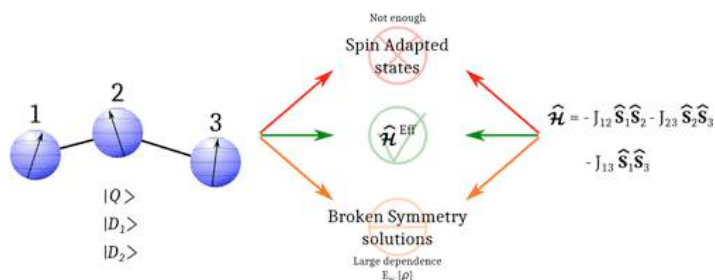
En aquesta secció es descriuen alguns dels resultats més rellevants obtinguts per cada línia de recerca de l'IQTCUB.

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

**Magnetic coupling constants in three electrons three centers problems from effective hamiltonian theory and validation of broken symmetry-based approaches**

D. Reta, I. de P.R. Moreira, F. Illas.

**J. Chem. Theory Comput.**, 12 (2016) 3228.

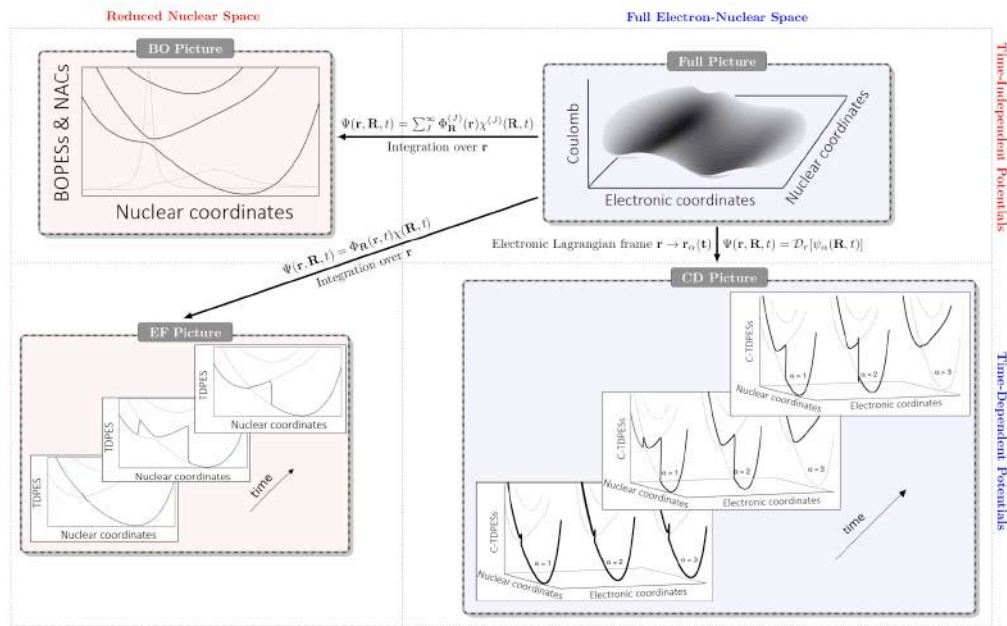


En el cas més general de sistema magnètic amb tres electrons en tres centres no relacionats per simetria que donen lloc a tres centres magnètics amb  $S_1 = S_2 = S_3 = \frac{1}{2}$ , els estats de més baixa energia corresponen a 3 estats d'espín purs: un quartet (Q) i dos doblets ( $D_1$ ,  $D_2$ ). La separació energètica entre aquests estats d'espín es pot descriure amb el Hamiltonià d'espín de Heisenberg-Dirac-Van Vleck (HDVV) i les corresponents diferències d'energia s'expressen en termes de les tres constants d'acoblament magnètic a dos cossos  $J_{12}$ ,  $J_{23}$  i  $J_{13}$ . En aquest cas, però, els valors de les tres constants d'acoblament magnètics no es poden extreure utilitzant les dues úniques diferències d'energia linealment independents entre estats d'espín purs. S'investiga aquest problema magnètic mitjançant la teoria dels Hamiltonians efectius ab initio utilitzant funcions d'ona MRCI que ens permeten validar l'aproximació de simetria trencada per extreure el valor de  $J_{12}$ ,  $J_{23}$ ,  $J_{13}$  en el cas general no simètric.

**Universal steps in quantum dynamics with time-dependent potential-energy surfaces: Beyond the Born-Oppenheimer picture**

G. Albareda, A. Abedi, I. Tavernelli, and A. Rubio.

Phys. Rev. A., 94 (2016) 062511.

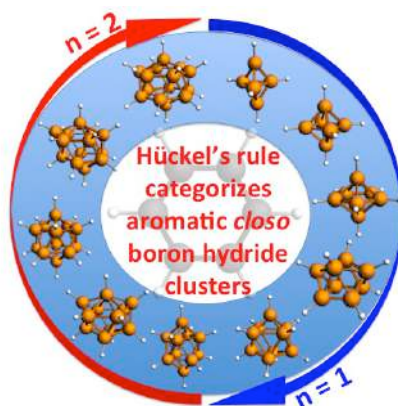


Recentment s'ha demostrat [G. Albareda et al., Phys. Rev. Lett. 113, 083003 (2014)] que en el marc de la descomposició condicional de la dinàmica acoblada electró-nucli, la funció d'ona molecular pot ser descomposta de manera exacta en un conjunt de paquets d'ona nuclears la dinàmica dels quals ve dictada per superfícies de potencial condicionals depenent del temps (C-TDPESs). Per mitjà d'un sistema model unidimensional, es demostra que per a acoblaments no-adiabàtics forts, les C-TDPESs presenten discontinuïtats que connecten diferents superfícies de potencial de Born-Oppenheimer. La naturalesa d'aquestes discontinuïtats s'ha identificat com un efecte de la correlació electró-nucli. A demés, la comparació directa amb discontinuïtats similars recentment descrites en el context de la factorització exacta de la funció d'ona molecular ens permet concloure la universalitat d'aquestes discontinuïtats, viz., son inherents a totes les descripcions de la dinàmica no-adiabàtica basades en superfícies de potencial (exactes) dependents del temps.

**Hückel's rule of aromaticity categorizes aromatic closo boron hydride clusters**

J. Poater, M. Solà, C. Viñas, F. Teixidor.

Chem. Eur. J., 22 (2016) 7437.



S'ha establert una connexió directa entre els hidrurs de bor closo amb aromaticitat tridimensional i l'aromaticitat dels  $[n]$ anulens plans per clústers de bor mitjans i grans. Els resultats demostren l'existència d'un vincle entre la regla de Hückel d'aromaticitat en dues dimensions, seguida pels  $[n]$ anulens aromàtics, i l'aromaticitat en tres dimensions donada per la regla de Wade-Mingo, tal com s'observa a partir dels hidrurs de bor closo aromàtics  $[B_nH_n]^{2-}$ . Els hidrurs de bor closo es poden classificar en diferents sèries, d'acord amb el valor  $n$  de la regla de Hückel  $(4n+2)\pi$ . Les diferents categories estudiades en aquest treball corresponen a  $n = 1, 2, i 3$ . Cada categoria augmenta en dificultat geomètrica, però el més important és el fet que és possible associar cada categoria amb el nombre de capes en l'estructura de pentàgons perpendicular a l'eix principal. Així, la categoria 1 té una capa pentagonal, la categoria 2 en té dues, i la categoria 3 en té tres.

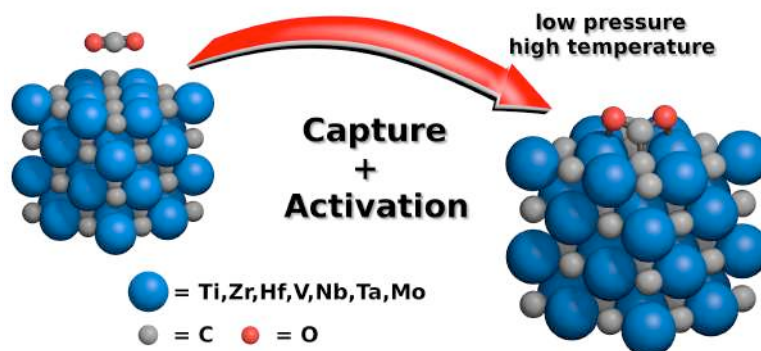


**LÍNIA 2. CIÈNCIA DELS MATERIALS COMPUTACIONAL**

**Transition metal carbides as novel materials for CO<sub>2</sub> capture, storage, and activation**

C. Kunkel, F. Viñes, F. Illas.

*Energy Environ. Sci.*, 9 (2016) 141.



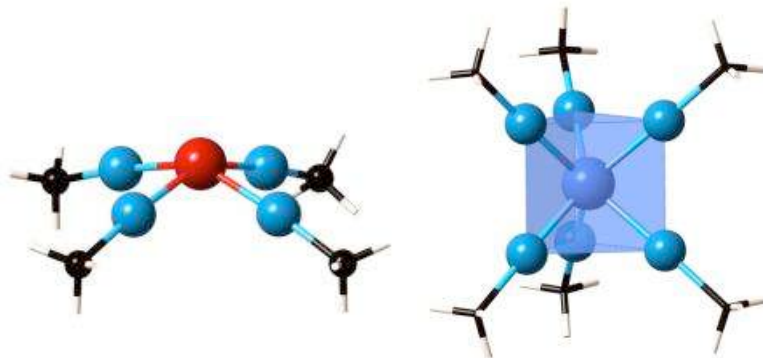
El CO<sub>2</sub> es capaç de adsorbir-se i activar-se en diferents carburs de metalls de transició a baixes pressions i fins i tot a altes temperatures.

La captura i activació de diòxid de carboni (CO<sub>2</sub>), gas de efecte hivernacle, és un prerequisit al seu reformat o conversió. Aquí mostrem, mitjançant càlculs de la teoria del funcional de la densitat incloent forces dispersives, que el carburs de metalls de transició (TMC; TM = Ti, Zr, Hf, Nb, Ta, Mo) són capaços de atrapar i activar el CO<sub>2</sub> en les seves superfícies més estables (001) amb una força de enllaç considerable. Les estimacions de les velocitats de adsorció i desorció prediuen una captura de CO<sub>2</sub> a temperatura ambient i fins i tot a baixes pressions, cosa que planteja la utilització de TMCs com a potencials materials per l'abatiment de CO<sub>2</sub>.

**From widely accepted concepts in coordination chemistry to inverted ligand fields**

R. Hoffmann, S. Alvarez, C. Mealli, A. Falceto, T. J. Cahill, T. Zeng, G. Manca.

*Chem. Rev.*, 116 (2016) 8173.



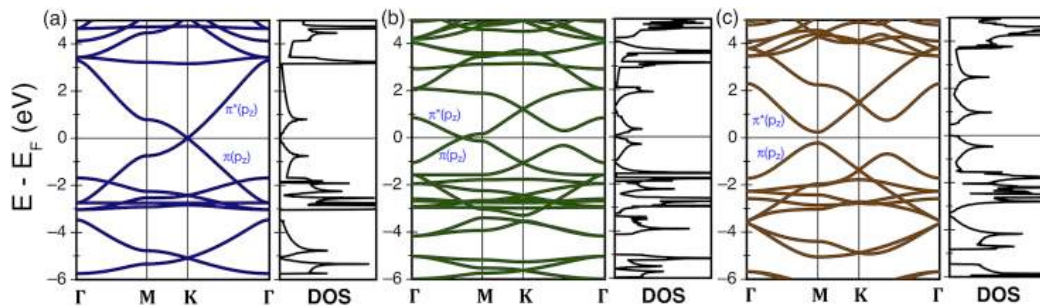
Compostos proposats per a la inversió del desdoblament dels orbitals d:  $[\text{Rh}(\text{AlMe})_4]^+$  i  $[\text{Mo}(\text{AlMe})_6]$ .

Hem dissenyat una estratègia per invertir el desdoblament normal dels orbitals d dels metalls en presència d'un camp de lligands i hem construït computacionalment diversos sistemes amb el lligand  $\text{AlCH}_3$ , hipotètic però realista. Hem dedicat una atenció especial al cas pla-quadrat exemplificat per  $[\text{Cu}(\text{CF}_3)_4]^-$ , al qual Snyder tingué la premonició de veure un cas de camp invertit, amb l'orbital de valència buit centrat majoritàriament als lligands, i l'orbital  $d_{x^2-y^2}$  altament ocupat, en allò que normalment anomenaríem un complex de  $\text{Cu}(\text{III})$ . Per a  $[\text{Cu}(\text{CF}_3)_4]^-$  proporcionem l'evidència teòrica a partir de les distribucions electròniques, la geometria dels lligands, la termoquímica de la formació de la molècula, i l'energia d'abstracció del lligand  $\text{CF}_3$  per una base, tot coherent amb l'oxidació dels lligands en aquesta molècula. L'exploració dels camps de lligands inversos ens ajuda a veure la transició contínua, sense fronteres, de l'enllaç en metalls de transició a l'enllaç en elements del bloc p. També donem a conèixer discrepàncies amigables sobre els estats d'oxidació en aquestes molècules destacables.

## First-principles study of structural, elastic and electronic properties of $\alpha$ -, $\beta$ - and $\gamma$ -graphyne

A. Ruiz-Puigdollers, P. Gamallo.

**Carbon** 96 (2016) 879.

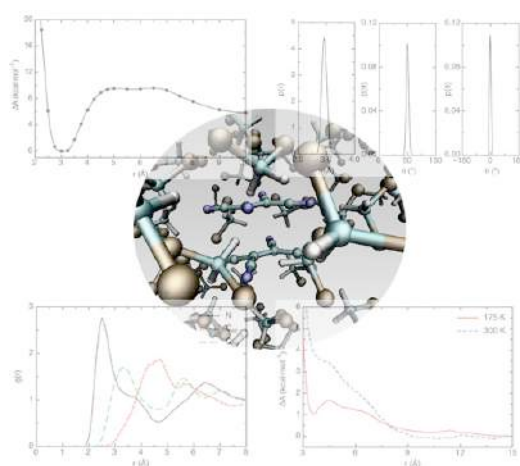


Estructura de bandes i densitat d'estats del (a)  $\alpha$ -. (b)  $\beta$ -, i (c)  $\gamma$ -grafí.

Aquest estudi presenta diferents propietats calculades a nivell DFT per a al·lòtrops de carboni de 2D:  $\alpha$ -,  $\beta$ - i  $\gamma$ -grafí. D'entre el conjunt de propietats estudiades n'hi han d'estructurals (*p. ex.*, energies de cohesió, paràmetres de cel·la òptims, distàncies interatòmiques, tamany de porus, densitats d'empaquetament i àrees superficials específiques), mecàniques (*p. ex.*, tensions uniaxials i biaxials i índex de Poisson) i propietats electròniques (*p. ex.*, estructura de bandes, densitat d'estats, localització de punts de Dirac o de gaps energètics, velocitats de Fermi associades als primers i les masses efectives associades als últims). Bàsicament, els grafins presenten energies de cohesió, densitats d'empaquetament en el pla i velocitats de Fermi més baixes que el grafè. Per altra banda, els grafins tenen una varietat de porus més gran i un índex de Poisson també més elevat que el grafè. Aquests fets fan dels grafins uns bons candidats per al seu ús com a membranes per a una gran varietat de separacions i per a aplicacions que necessitin un material més tou mantenint, en menor grau, algunes de les propietats electròniques considerades excepcionals en el grafè.

**Formation of long, multicenter  $\pi$ -[TCNE]<sub>2</sub><sup>2-</sup> dimers in solution: solvation and stability assessed through molecular dynamics simulations**

M. Capdevila-Cortada, J. Ribas-Ariño, A. Chaumont, G. Wipff, J. J. Novoa.

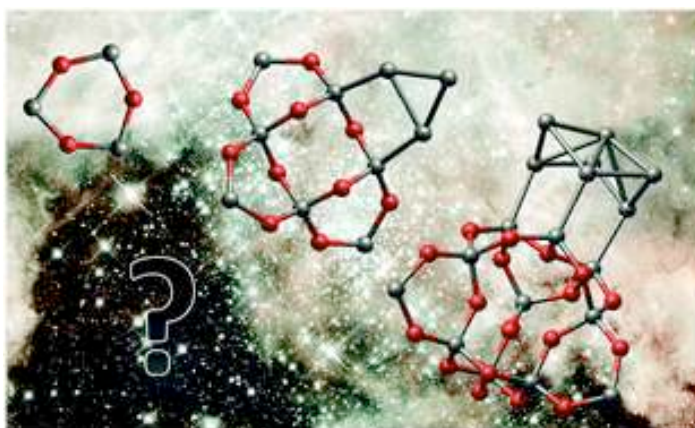
**Chem. Eur. J.**, 22 (2016) 17037.

La tendència que presenten certs ions-radicals orgànics a formar dímers  $\pi$  en dissolució és sorprenent donada la metaestabilitat d'aquests dímers en fase gas. En aquest article, es va presentar el primer estudi computacional d'aquest tipus de dímers en dissolució en què es consideren explícitament les molècules de dissolvent i efectes tèrmics. L'estructura i estabilitat dels dímers  $\pi$  d'anions TCNE<sup>-</sup> en diclorometà van ser avaluades mitjançant simulacions de dinàmica molecular i simulacions d'energia lliure. Mentre que els dímers dissocien a temperatura ambient, aquests són estables a 175 K i llur estructura és similar a l'observada en estat sòlid, amb una disposició cofacial dels radicals, amb una separació entre plans de 3 Å. Els dímers de TCNE<sup>-</sup> no formen parells iònics amb els contraions de la dissolució i la seva primera esfera de solvatació inclou 20 molècules de diclorometà, 8 de les quals es troben en el pla equatorial del dímer i l'estabilitzen mitjançant contactes C-H $\cdots$ N. L'energia lliure de dimerització del TCNE<sup>-</sup> en dissolució a 175 K és de -5.5 kcal mol<sup>-1</sup>. Aquest article proporciona el primer model capaç de descriure quantitativament la formació de parells d'ions radicals en dissolució i demostra el rol important que tenen les forces de solvatació en el procés de dimerització.

**Under what conditions does  $(\text{SiO})_N$  nucleation occur? A bottom-up kinetic modelling evaluation**

S. T. Bromley, J. C. Gómez Martín, J. M. C. Plane.

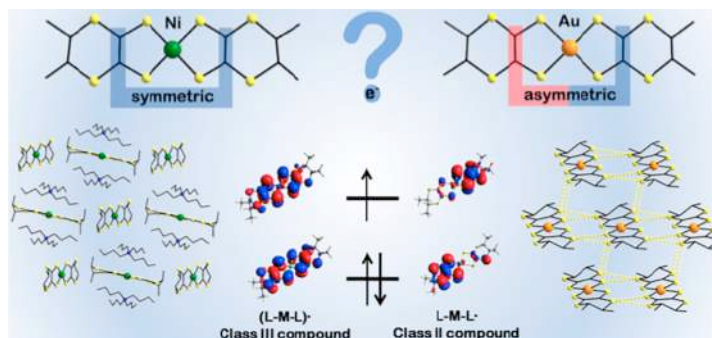
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, 18 (2016) 26913.



Encara que els segregats nanomètrics de SiO tenen un gran potencial tecnològic i també un enorme interès astronòmic, una descripció general precisa de la nucleació del SiO és encara insuficient. Hem realitzat una avaluació de la varietat de condicions tant de pressió com de temperatura per a la qual serà o no possible la formació de SiO.

### Localization versus delocalization in chiral single component conductors of gold bis(dithiolene) complexes

D.G. Branzea, F. Pop, P. Auban-Senzier, R. Clérac, P. Alemany, E. Canadell, N. Avarvari.  
**J. Am. Chem. Soc.**, 138 (2016) 6838.

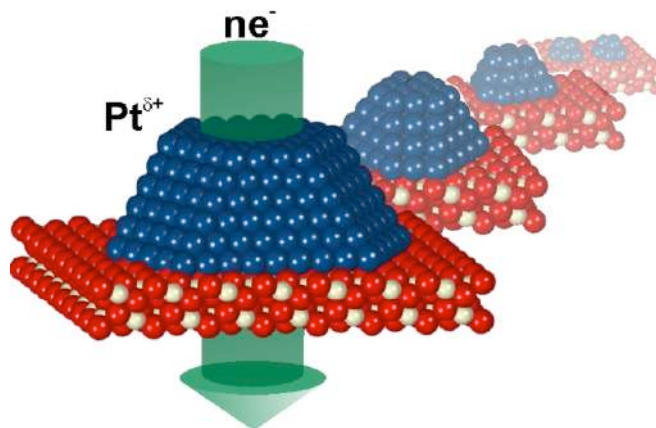


Els complexos neutres  $[\text{Au}(\text{dm-dddt})_2]$  presenten una estructura asimètrica i una naturalesa de valència mixta que té importants conseqüències en la seva conductivitat elèctrica en estat sòlid.

En aquest treball es presenten els primers exemples coneguts de conductors quirals d'un sol component. Els dos enantiòmers, (S,S) i (R,R), del lligand 5,6-dimetil-5,6-dihidro-1,4-ditiino-2,3-ditiolat (dm-dddt) s'han usat per preparar els complexos neutres  $[\text{M}(\text{dm-dddt})_2]$  ( $\text{M}=\text{Au},\text{Ni}$ ). La característica estructural més peculiar d'aquests és la dissimetria entre els dos lligands ditiolè trobada per al complex d'or, mentre que el compost amb Ni és perfectament simètric. Les mesures de resistivitat mostren que el compost d'or, amb capes obertes, presenta conductivitat activada tèrmicament amb energies d'activació fortament dependents de la pressió hidrostàtica. Un estudi teòric detallat per a compostos similars amb Ni (radicals aniònics) i Au (radicals neutres) adreçat a la qüestió de la simetria / asimetria des del punt de vista de l'acoblament electrònic entre els dos fragments ditiolè mostra que els complexos neutres d'or amb lligands sense una deslocalització estesa són compostos de valència mixta de classe II en la classificació de Robin i Day, amb una tendència inherent a adoptar estructures asimètriques que es veu, de tota manera, modulada per la organització intermolecular en l'estat sòlid.

### Counting electrons on supported nanoparticles

Y. Lykhach, S. M. Kozlov, T. Skála, A. Tovt, V. Stetsovych, N. Tsud, F. Dvořák, V. Johánek, A. Neitzel, J. Mysliveček, S. Fabris, V. Matolín, K. M. Neyman, J. Libuda  
**Nature Materials** 15 (2016) 284.



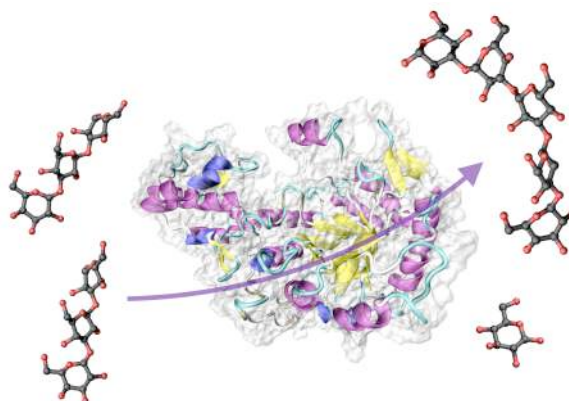
La clau dels materials catalítics avançats rau en les interaccions electròniques entre nanopartícules metàl·liques i els seus suports. Combinant experiments model i teoria, podem respondre a una de les preguntes relacionades amb aquestes interaccions: Quina és la càrrega d'una partícula catalítica suportada? Quantifiquem la transferència de càrrega per l'important cas pràctic de les partícules de platí suportades en òxid de ceri i racionalitzem l'origen de la seva dependència amb la mida de la partícula.

### LÍNIA 3. BIOQUÍMICA COMPUTACIONAL I *SOFT MATTER*

#### **A trapped covalent intermediate of a glycoside hydrolase on the pathway to transglycosylation. Insights from experiments and QM/MM simulations**

L. Raich, V. Borodkin, W. Fang, J. Castro-López, D. van Aalten, R. Hurtado-Guerrero, C. Rovira.

**J. Am. Chem. Soc.**, 138 (2016) 3325.



Reacció enzimàtica catalitzada per un enzim transglicosilasa (síntesi d'un enllaç glicosídic).

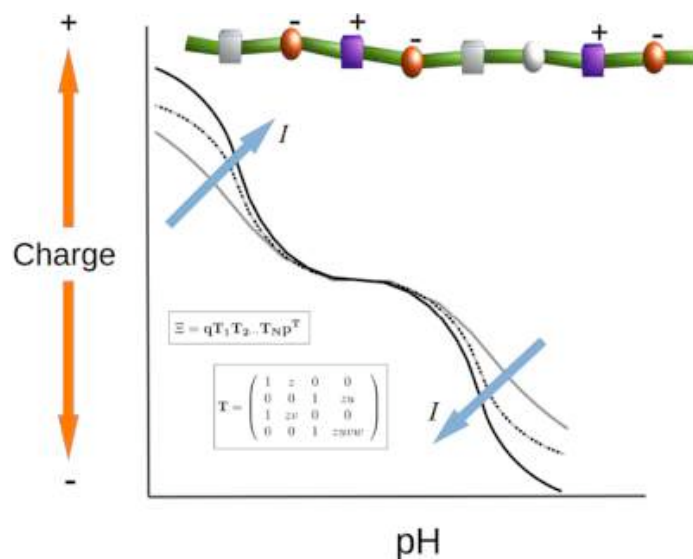
La conversió de glicosidases a transglicosidases, és a dir, d'enzims que hidrolitzen carbohidrats a enzims que els sintetitzen, ha estat molt estudiada en els darrers anys. Tot i així, la falta d'estructures tridimensionals d'enzims i el desconeixement dels detalls dels mecanismes de reacció limiten el disseny racional de transglicosidases. En aquest article presentem la primera estructura cristal·logràfica de l'intermedi de reacció d'una transglicosidasa amb un carbohidrat intacte al centre actiu. Per mitjà de la simulació computacional, demostrem que aquest complex enzimàtic està preparat per catalitzar la formació d'un nou enllaç glicosídic (reacció de transglicosidació) i proposem que la modificació d'un determinat aminoàcid milloraria significativament l'activitat sintètica d'enzims d'aquesta família.



**Dealing with long-range interactions in the determination of polyelectrolyte ionization properties. Extension of the transfer matrix formalism to the full range of ionic strengths**

J. L. Garcés, S. Madurga, C. Rey-Castro, F. Mas.

*J. Polym. Sci. Part B. Polym. Phys.*, doi: 10.1002/polb.24269.

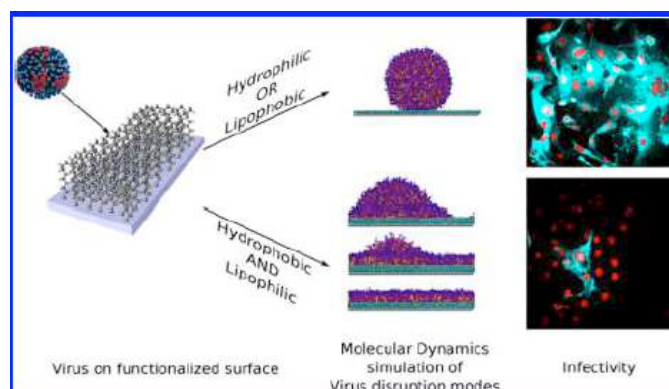


La tècnica de la matriu de transferència és una tècnica molt potent per resoldre els models de tipus Ising de *binding* de protons a polielectròlits, però el seu ús està restringit a les interaccions de curt abast. En aquest treball s'estén la tècnica per incloure interaccions de llarg abast. Les corbes de valoració resultants que corresponen a diferents models de *binding* (homogènies, heterogènies, poliamfòlits) són extremadament precises i indistingibles en la pràctica dels obtinguts per simulacions de Monte Carlo.

### Functionalized surfaces with tailored wettability determine influenza A infectivity

I. Mannelli, R. Reigada, I. Suárez, D. Janner, A. Carrilero, P. Mazumder, F. Sagués, V. Pruneri, M. Lakadamyali.

**ACS Applied Materials and Interfaces**, 8 (2016) 15058.

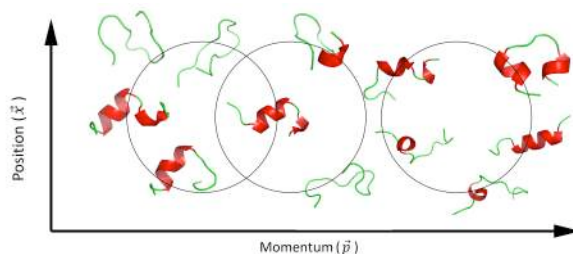


El contacte d'un virus amb una superfície funcionalitzada pot donar lloc a diversos mecanismes d'interacció i eventualment produir el trencament de la seva membrana lipídica i com a conseqüència una reducció de la infectivitat.

Les superfícies contaminades amb microorganismes poden contribuir a la seva transmissió i dispersió. El desenvolupament de "superfícies actives" que poden reduir o eliminar aquesta contaminació requereix la comprensió dels mecanismes moleculars de les interaccions entre superfícies i microorganismes. Hem estudiat els efectes de superfícies funcionalitzades amb alquil- i fluoro-silans en la infectivitat del virus de la grip utilitzant mètodes experimentals i computacionals com la fluorescència a temps real i la dinàmica molecular. Demostrem com les superfícies que són a l'hora hidrofòbiques i oleofíliques són les més eficients per desactivar els virus. Els nostres resultats suggereixen que el mecanisme de desactivació implica la disrupció de la membrana lipídica dels virus un cop entra en contacte amb la superfície. Aquestes característiques fan que aquest tipus de superfícies siguin prometedores per aplicacions en hospitals i infraestructures similars on l'acció antiviral pot ser important.

**Assessment of the sampling performance of multiple-copy dynamics versus a unique trajectory**

J. J. Pérez, M. S. Tomas, J. Rubio-Martínez.

**J. Chem. Inf. Model.**, 56 (2016) 1950.

Mostreig de l'espai configuracional amb múltiples trajectòries

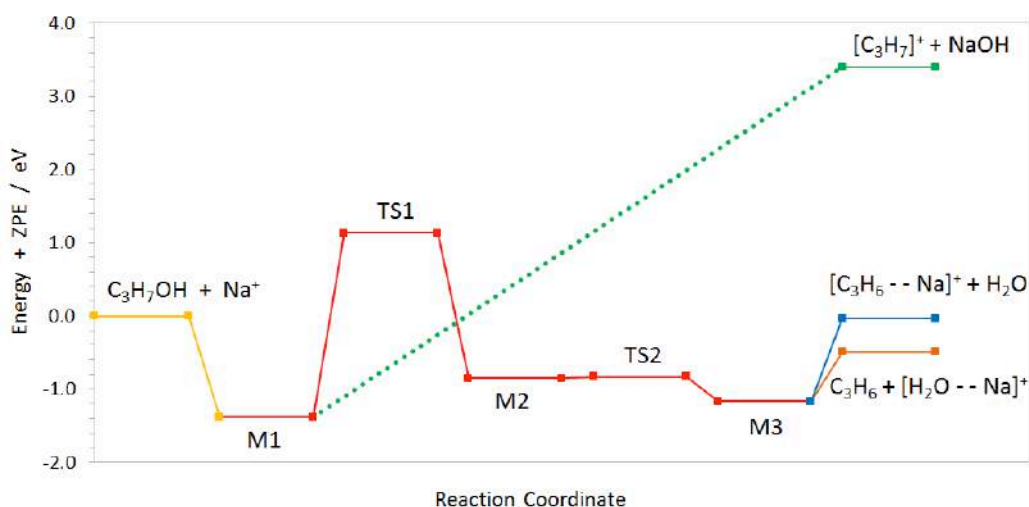
En aquest treball es va fer un extens estudi per determinar el comportament diferencial d'una trajectòria de dinàmica molecular llarga davant de diverses més curtes partint de diferents punts de l'espai de fases i que cobreixen el mateix temps de mostreig. Amb aquesta finalitat es va seleccionar el pèptid Bak<sub>16</sub>BH3 com a model d'estudi i es van dur a terme diversos mostrejos amb solvent explícit. Els mostrejos inclouen una trajectòria de 8  $\mu$ s; dues de 4  $\mu$ s; quatre de 2  $\mu$ s; vuit de 1  $\mu$ s; setze de 0.5  $\mu$ s i vuitanta de 0.1  $\mu$ s. D'altra banda, la trajectòria de 8  $\mu$ s es va ampliar a 16  $\mu$ s per tenir valors de referència respecte de les diverses propietats mesurades. Com a conclusió els nostres resultats suggereixen que múltiples trajectòries curtes podrien proporcionar un millor mostreig que una trajectòria única. No obstant això, s'ha de tenir precaució ja que les trajectòries curtes han de ser prou llargues per superar les barreres locals que envolten el punt de partida. Una manera eficaç d'aconseguir informació sobre la longitud mínima de la trajectòria requereix el control de la convergència amb una característica estructural, com ara el contingut helicoïdal del pèptid.

## LÍNIA 4. REACTIVITAT I DINÀMICA DE REACCIONS

**Dehydrohalogenation and dehydration reactions of *i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>Br and *i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>OH by sodium ions studied by guided ion beams techniques and quantum chemical methods.**

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

*J. Phys. Chem. A*, 120 (2016) 4758.



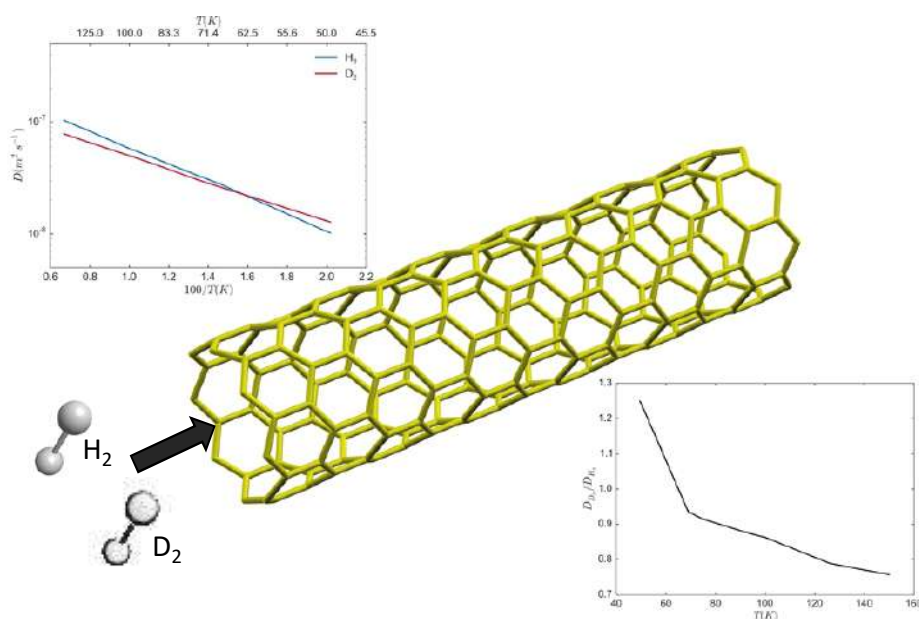
Perfil esquemàtic de les ZPE al llarg de la reacció calculat a nivell *ab initio* MP2 per l'estat singlet fonamental per les col·lisions Na<sup>+</sup> + *i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>OH mostrant els diferents mínims (M) i estats de transició (TS) sobre la SEP i la seva connectivitat amb IRC.

Les reaccions d'eliminació en gas del *i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>Br i *i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>OH induïdes per col·lisions amb Na<sup>+</sup> en els seus estats electrònics fonamentals, s'han estudiat per tècniques de feixos guiats per radiofreqüència (RF-GIB) a energies al centre de masses entre 0.10 - 10.00 eV. Na<sup>+</sup> + *i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>Br porten a [Na-*i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>Br]<sup>+</sup>, [C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>-Na]<sup>+</sup>, [HBr-Na]<sup>+</sup> i C<sub>3</sub>H<sub>7</sub><sup>+</sup> mentre que Na<sup>+</sup> + *i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>OH només donen [Na-*i*-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>OH]<sup>+</sup>, [H<sub>2</sub>O-Na]<sup>+</sup> C<sub>3</sub>H<sub>7</sub><sup>+</sup>. Per a tots el productes es mesuraren les funcions d'excitació en unitats absolutes i a partir d'elles s'obtingueren les constant de velocitat de formació de [C<sub>3</sub>H<sub>6</sub>-Na]<sup>+</sup>, [HBr-Na]<sup>+</sup> i [H<sub>2</sub>O-Na]<sup>+</sup> a 303 K. Càlculs *ab initio* a nivell MP2 aporten informació sobre les superfícies de potencial (SEP) on les reaccions d'eliminació i descomposició tenen lloc adiabàticament, caracteritzant-se mínims i estats de transició connectats al llarg de l'IRC. La topologia de les SEP expliquen qualitativament els resultat obtinguts i l'efecte catalític del ions sodi a les reaccions d'eliminació.

## Diffusion of H<sub>2</sub> and D<sub>2</sub> confined in single-walled carbon nanotubes: quantum dynamics and confinement effects

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

*J. Phys. Chem. A* 120 (2016) 6501.



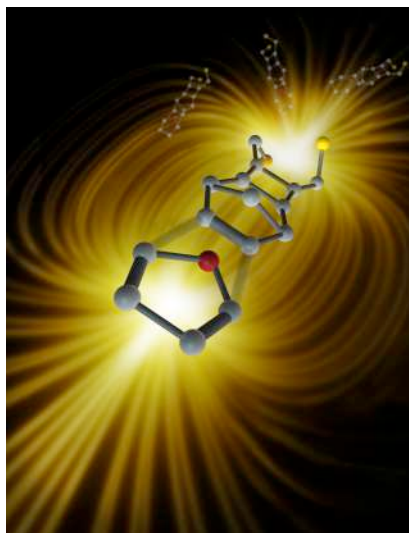
Al centre de la figura, il·lustració del procés de difusió de les molècules de dihidrogen i dideuteri en un SWCNT. Gràfic superior: Constants de difusió calculades en funció de  $100/T$ . Gràfic inferior: coeficient de selectivitat en funció de la temperatura.

En aquesta publicació es presenten càlculs de dinàmica quàntica de la constant de difusió del H<sub>2</sub> i D<sub>2</sub> al llarg nanotubs de carboni d'una sola paret (SWCNTs) en un interval de temperatures entre 50 i 150 K. Es van calcular les velocitats de difusió respectives en el límit de baixa pressió mitjançant l'adaptació del formalisme de les funcions de correlació flux del camp de la dinàmica de processos químics al model de salts (hopping) usat en les simulacions de difusió. Es van emprar dues Superfícies d'Energia Potencial per a modelar la interacció C-H. Els nostres resultats prediuen l'efecte isotòpic cinètic habitual, amb difusió del H<sub>2</sub> més ràpida que la del D<sub>2</sub> en el règim de temperatura més alta, però una tendència inversa a temperatures inferiors entre 50 i 70 K. Aquests resultats són consistents amb observacions experimentals en sistemes similars, i es poden explicar per la diferent grandària efectiva de tots dos isòtops que resulta de la diferència en Energia de Punt Zero.

### Electrostatic catalysis of a Diels-Alder reaction

A. C. Aragonès, N. L. Haworth, N. Darwish, S. Ciampi, N. J. Bloomfield, G. G. Wallace, I. Diez-Perez, M. L. Coote

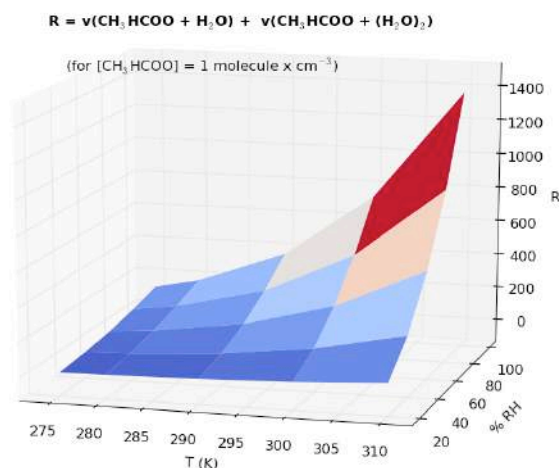
**Nature**, 531 (2016) 88.



La publicació representa la primera demostració experimental de catàlisi d'una reacció de formació C-C amb reactius no-redox per l'efecte d'un cap electrostàtic extern orientat. Els resultats obren nous reptes en el disseny de processos sintètics de productes químics industrials emprant un camp elèctric com a catalitzador de la reacció.

**Impact of the water dimer on the atmospheric reactivity of carbonyl oxides**

J.M. Anglada, A. Solé.

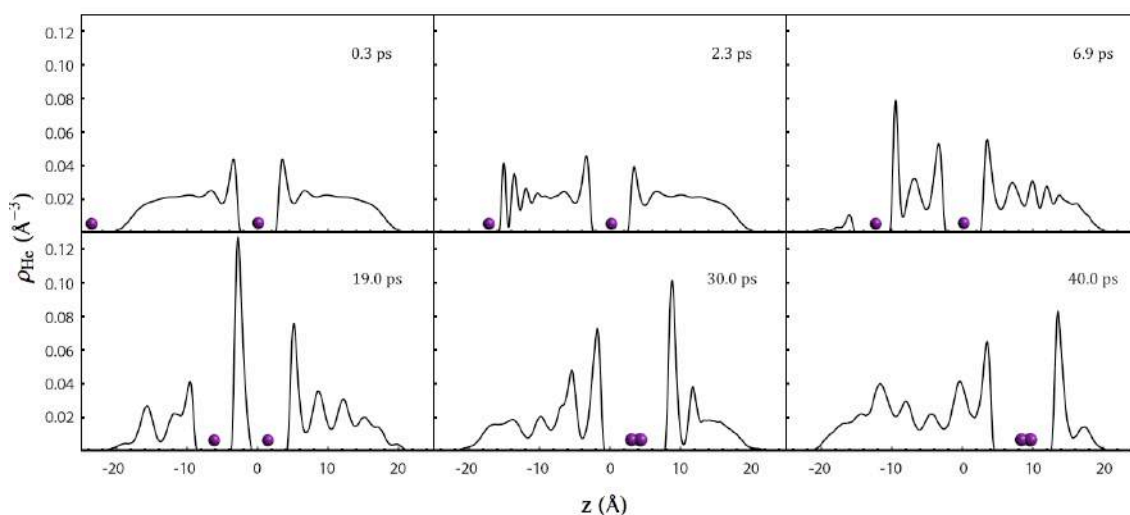
**Phys. Chem. Chem. Phys.**, 18 (2016) 17698.

S'han investigat les reaccions de dotze òxids de carbonil o intermedis de Criegee amb el monòmer i amb el dímer de l'aigua emprant mètodes teòrics d'alt nivell. L'estudi inclou tot els possibles òxids de carbonil derivats de l'ozonòlisi de l'isoprè i els òxids de carbonil metil i dimetil que s'originen a partir de la reacció de l'ozó amb diversos hidrocarburs. Aquestes reaccions tenen una gran importància en la química de l'atmosfera perquè els intermedis de Criegee han estat identificats recentment com a importants oxidants a la troposfera i com a precursors d'aerosols orgànics secundaris. D'altra banda, el vapor d'aigua és un dels gasos traça més abundants a l'atmosfera i el dímer d'aigua pot desencadenar la descomposició atmosfèrica dels intermedis de Criegee. Els nostres càlculs mostren que la naturalesa i la posició dels substituents en els òxids de carbonil juguen un paper molt important en la reactivitat d'aquestes espècies tant amb el monòmer com amb el dímer de l'aigua. Aquest fet dona lloc a diferències en les constants de velocitat de fins a sis ordres de magnitud en funció de l'òxid de carbonil. En aquest treball s'ha definit una constant de velocitat efectiva ( $k_{\text{eff}}$ ) per a la reacció atmosfèrica d'òxids de carbonil amb vapor d'aigua, que depèn de la temperatura i també de la humitat relativa. Amb aquesta  $k_{\text{eff}}$  mostrem que el dímer d'aigua, malgrat la seva baixa concentració a la troposfera, augmenta la reactivitat atmosfèrica dels intermedis de Criegee, però el seu efecte canvia amb la naturalesa de l'òxid de carbonil, que oscil·la entre 59 i 295 vegades en el cas més favorable (òxid de carbonil syn-metil), i només entre 1,4 i 3 vegades en el cas més desfavorable.

### Reaction dynamics inside superfluid helium nanodroplets: the formation of the Ne<sub>2</sub> molecule from Ne + Ne@(<sup>4</sup>He)<sub>N</sub>

A. Vilà, M. González

Phys. Chem. Chem. Phys., 18 (2016) 31869.



Les instantànies mostren l'evolució temporal de la densitat d'heli al llarg de l'eix Ne-Ne (eix  $z$ ) per a la reacció Ne + Ne@(<sup>4</sup>He)<sub>500</sub> a la velocitat mitjana inicial del Ne de 300 m/s ( $J=0$ ).

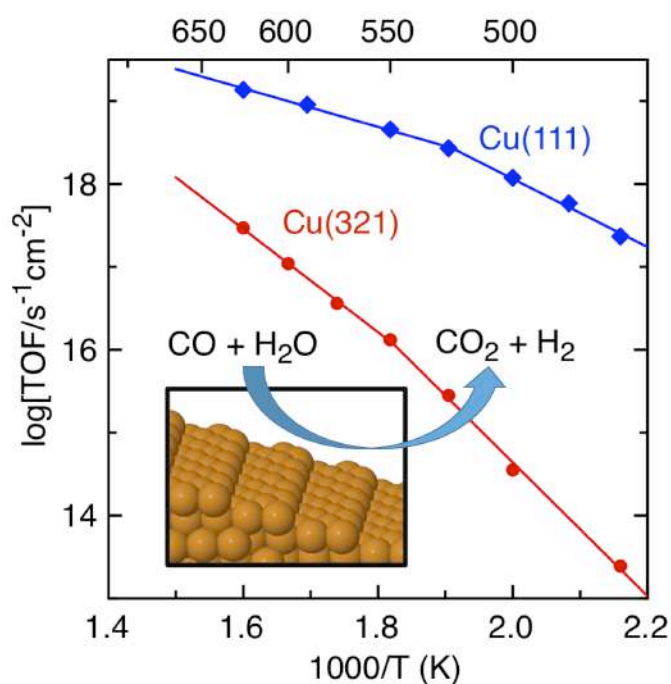
El tractament TDDFT híbrid proposat per nosaltres (J. Chem. Theory Comput., 2015, 11, 899) s'ha estès a l'estudi dels processos reactius que impliquen una nanogota d'heli superfluid  $[A + B@^4\text{He}_N \rightarrow AB@^4\text{He}_N + (N-N')^4\text{He}]$ ;  $T=0.37$  K. Aquest és el primer intent teòric per estudiar la dinàmica de reacció de processos de tipus bimolecular que impliquen <sup>4</sup>He<sub>N</sub> i la reacció Ne + Ne@<sup>4</sup>He<sub>N</sub> ha estat el primer exemple de l'aplicació ( $J=0$ ). Es va examinar la influència de la mida de la nanogota ( $N= 200$ -1000) i la velocitat inicial de l'àtom de Ne exterior ( $\langle v_0 \rangle = 120$ -1000 m / s). L'àtom de Ne interior només produeix una major reducció de la velocitat de l'àtom Ne exterior en comparació amb el que succeeix en el cas de la captura d'un àtom de Ne per una nanogota pura. La formació de la molècula és un fenomen complex relacionat amb la naturalesa de les ones de densitat d'heli produïts i la seva reflexió de la superfície de la nanogota. Aquest tractament quàntic també pot aplicar-se a l'estudi de la fotodissociació d'una molècula diatòmica arbitrari en <sup>4</sup>He<sub>N</sub>.



### Comparing the catalytic activity of the water gas shift reaction on Cu(321) and Cu(111) surfaces: step sites do not always enhance the overall reactivity

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

J. Cat., 342 (2016) 75.



Es presenta un estudi cinètic de Montecarlo (kMC), basat en la Teoria Funcional de Densitat, sobre la reacció de desplaçament d'aigua sobre una superfície esglaonada de Cu (321). Utilitzem el mètode recentment desenvolupat kMC gràfic-teòric juntament amb l'expansió del clúster de hamiltonians per modelar les barreres d'energia dels diferents processos en superfície, incloent l'adsorció/desorció, difusió i altres reaccions químiques elementals, sumant un total de 36 reaccions elementals, que permeten dos possibles mecanismes de competitiu: redox de superfície i associatiu via COOH. Tots els resultats són comparats amb un estudi previ de kMC sobre Cu (111). S'observen ambdós mecanismes per la superfície de Cu (321) amb diferent extensió, mentre que l'associatiu via COOH era el dominant en el cas del Cu (111). El present estudi mostra que, tot i les barreres d'energia d'activació són menors, les superfícies esglaonades no necessàriament tenen una activitat catalítica total més gran. Efectes de recobriment i la important contribució d'alguns dels processos inversos estan darrere d'aquest comportament.

## III.2 LLISTA DE PUBLICACIONS

## ARTICLES PUBLICATS

1. *Functionalized surfaces with tailored wettability determine influenza A infectivity.*  
I. Mannelli, R. Reigada, I. Suárez, D. Janner, A. Carrilero, P. Mazumder, F. Sagués, V. Pruneri, M. Lakadamyali.  
**ACS Appl. Mater. Interfaces** 8 (2016) 15058.
2. *Highly versatile polyelectrolyte complexes for improving the enzyme replacement therapy of lysosomal storage disorders.*  
M. I. Giannotti, I. Abasolo, M. Oliva, F. Andrade, N. Garcia-Aranda, M. Melgarejo, D. Pulido, J. L. Corchero, Y. Fernandez, A. Villaverde, M. Royo, M. F. Garcia-Parajo, F. Sanz, S. Schwartz.  
**ACS Appl. Mater. Interfaces** 8 (2016) 25741.
3. *The interplay between homogeneous and heterogeneous phases of PdAu catalysts for the oxidation of alcohols.*  
J. Jover, M. García-Ratés, N. López.  
**ACS Catal.** 6 (2016) 4135.
4. *A  $\beta$ -mannanase with a lysozyme fold and a novel molecular catalytic mechanism.*  
Y. Jin, M. Petricevic, A. John, L. Raich, H. Jenkins, L. Portela De Souza, F. Cuskin, H. J. Gilbert, C. Rovira, E. D. Goddard-Borger, S. J. Williams, G. J. Davies.  
**ACS Cent. Sci.** 2 (2016) 896.
5. *Sequential electron transport and vibrational excitations in an organic molecule coupled to few-layer graphene electrodes.*  
E. Burzuri, J. O. Island, R. Diaz-Torres, A. Fursina, A. Gonzalez-Campo, O. Roubeau, S. J. Teat, N. Aliaga-Alcalde, E. Ruiz, H. S. J. van der Zant.  
**ACS Nano** 6 (2016) 2521.
6. *Tuning crystal ordering, electronic structure, and morphology in organic semiconductors: tetrathiafulvalenes as a model case.*  
R. Pfattner, S. T. Bromley, C. Rovira, M. Mas-Torrent.  
**Adv. Funct. Mat.** 26 (2016) 2256.
7. *Force-induced reversal of  $\beta$ -eliminations: stressed disulfide bonds in alkaline solution.*  
P. Dopieralski, J. Ribas-Ariño, P. Anjukandi, M. Krupicka, D. Marx.  
**Angew. Chem. Int. Ed.** 55 (2016) 1304.
8. *High efficiency of  $Pt^{2+}$  -  $CeO_2$  novel thin film catalyst as anode for proton exchange membrane fuel cells.*  
R. Fiala, A. Figueroba, A. Bruix, M. Vaclavu, A. Rednyk, I. Khalakhan, M. Vorokhta, J. Lavkova, F. Illas, V. Potin, I. Matolinova, K. M. Neyman, V. Matolín.  
**Appl. Catal. B – Environ.** 197 (2016) 262.

9. *Surface composition of magnetron sputtered Pt-Co thin film catalyst for proton exchange membrane fuel cells.*  
M. Vorokhta, I. Khalakhan, M. Václavu, G. Kovács, S. M. Kozlov, P. Kúš, T. Skála, N. Tsud, J. Lavková, V. Potin, I. Matolínová, K. M. Neyman, V. Matolín.  
**Appl. Surf. Sci.** 365 (2016) 245.
10. *Dust formation in the oxygen-rich AGB star IK Tauri.*  
D. Gobrecht, I. Cherchneff, A. Sarangi, J. M. C. Plane, S. T. Bromley.  
**Astronomy & Astrophysics** 585 (2016) A6.
11. *The reaction mechanism of retaining glycosyltransferases.*  
A. Ardèvol, J. Iglesias-Fernández, V. Rojas-Cervellera, C. Rovira.  
**Biochem. Soc. Transac.** 44 (2016) 51.
12. *First-principles study of structural, elastic and electronic properties of alpha-, beta- and gamma-graphyne.*  
A. Ruiz-Puigdollers, G. Alonso, P. Gamallo.  
**Carbon** 96 (2016) 879.
13. *Role of structural symmetry breaking in the structurally induced robust superlubricity of graphene and h-BN homo- and heterojunctions.*  
N. Ansari, F. Nazari, F. Illas.  
**Carbon** 96 (2016) 911.
14. *Modeling ceria-based nanomaterials for catalysis and related applications.*  
A. Bruix, K. M. Neyman.  
**Catal. Lett.** 146 (2016) 2053.
15. *Towards stable single-atom catalysts: strong binding of atomically dispersed transition metals on the surface of nanostructured ceria.*  
A. Figueroba, G. Kovács, A. Bruix, K. M. Neyman.  
**Catal. Sci. Technol.** 6 (2016) 6806.
16. *Reaction mechanism and regioselectivity of the Bingel-Hirsch addition of dimethyl bromomalonate to La@C<sub>2v</sub>-C<sub>82</sub>.*  
J. P. Martínez, M. Garcia-Borràs, S. Osuna, J. Poater, F. M. Bickelhaupt, M. Solà.  
**Chem. Eur. J.** 22 (2016) 5953.
17. *Hückel's rule of aromaticity categorizes aromatic closo boron hydride clusters.*  
J. Poater, M. Solà, C. Viñas, F. Teixidor.  
**Chem. Eur. J.** 22 (2016) 7437.
18. *The tetracyanopyridinide dimer dianion,  $\sigma$ -[TCNPy]<sub>2</sub><sup>2-</sup>.*  
J. Hao, A. L. Rheingold, M. Kavand, K. J. van Schooten, C. Boehme, M. Capdevila-Cortada, J. J. Novoa, E. Woss, G. Knor, J. S. Miller.  
**Chem. Eur. J.** 22 (2016) 12312.

19. *Electronic structure modulation in an exceptionally stable non-heme nitrosyl iron(II) spin-crossover complex.*  
L. Piñeiro-López, N. Ortega-Villar, M. C. Muñoz, G. Molnár, J. Cirera, R. Moreno-Esparza, V. M. Ugalde-Saldívar, A. Bousseksou, E. Ruiz, J. A. Real.  
**Chem. Eur. J.** 22 (2016) 12741.
20. *Rational design of lanthanoid single-ion magnets: predictive power of the theoretical Models.*  
J. J. Baldovi, Y. Duan, R. Morales, A. Gaita-Ariño, E. Ruiz, E. Coronado.  
**Chem. Eur. J.** 22 (2016) 13532.
21. *Lanthanide tetrazolate complexes combining single-molecule magnet and luminescence properties: the effect of the replacement of tetrazolate N3 by  $\beta$ -diketonate ligands on the anisotropy energy barrier.*  
J.-R. Jimenez, I. F. Diaz-Ortega, E. Ruiz, D. Aravena, S. J. A. Pope, E. Colacio, J. M. Herrera.  
**Chem. Eur. J.** 22 (2016) 14548.
22. *Redox-assisted self-assembly of a water-soluble cyanido-bridged mixed valence  $\{Co^{III}/Fe^{II}\}_2$  square.*  
L. Alcázar, G. Aullón, M. Ferrer, M. Martínez.  
**Chem. Eur. J.** 22 (2016) 15227.
23. *Formation of long, multicenter  $\pi$ -[TCNE] $_2^{2-}$  dimers in solution: solvation and stability assessed through molecular dynamics simulations.*  
M. Capdevila-Cortada, J. Ribas-Ariño, A. Chaumont, G. Wipff, J.J. Novoa.  
**Chem. Eur. J.** 22 (2016) 17037.
24. *Formation of a trifluorophosphane platinum(II) complex by P-F bond activation and phosphorus pentafluoride with a  $Pt^0$  complex.*  
N. Arnold, R. Bertermann, F. M. Bickelhaupt, H. Braunschweig, M. Drisch, M. Finze, F. Hupp, J. Poater, J. A. P. Sprenger.  
**Chem. Eur. J.** accepted doi: 10.1002/chem.201604997
25. *A push-pull organic dye with a quinoidal thiophene linker: photophysical properties and solvent effects.*  
C. Climent, A. Carreras, P. Alemany, D. Casanova.  
**Chem. Phys. Lett.** 663 (2016) 45.
26. *From widely accepted concepts in coordination chemistry to inverted ligand fields.*  
R. Hoffmann, S. Alvarez, C. Mealli, A. Falceto, T. J. Cahill, T. Zeng, G. Manca.  
**Chem. Rev.** 116 (2016) 8173.
27. *Multiscale study of mononuclear Co-II SMMs based on curcuminoid ligands.*  
R. Diaz-Torres, M. Menelaou, O. Roubeau, A. Sorrenti, G. Brandariz-de-Pedro, E. C. Sanudo, S. J. Teat, J. Fraxedas, E. Ruiz, N. Aliaga-Alcalde.  
**Chem. Sci.** 7 (2016) 2793.

28. *Violation of DNA neighbor exclusion principle in RNA recognition.*  
M. Yousuf, I. S. Youn, J. Yun, L. Rasheed, R. Valero, G. Shi, K. S. Kim.  
**Chem. Sci.** 7 (2016) 3581.
29. *A low spin manganese(IV) nitride single molecule magnet.*  
M. Ding, G. E. Cutsail Iii, D. Aravena, M. Amoza, M. Rouzieres, P. Dechambenoit, Y. Losovyj, M. Pink, E. Ruiz, R. Clérac, J. M. Smith.  
**Chem. Sci.** 7 (2016) 6132.
30. *Design of multi-functional 2D open-shell organic networks with mechanically controllable properties.*  
I. Alcón, D. Reta, I. de P. R. Moreira, S. T. Bromley.  
**Chem. Sci.** accepted doi: 10.1039/C6SC01412G
31. *Exploring the origin of 'aggregation induced emission' activity and 'crystallization induced emission' in organometallic iridium(III) cationic complexes: influence of counterions.*  
P. Alam, C. Climent, G. Kaur, D. Casanova, A.R. Choudhury, A. Gupta, P. Alemany, I. R. Laskar.  
**Cryst. Growth Des.** 16 (2016) 5738.
32. *Structural and electronic characterisation of pi-extended tetrathiafulvalene derivatives as active components in field-effect transistors.*  
A. Campos, N. Oxtoby, S. Galindo, R. Pfattner, J. Veciana, S. T. Bromley, C. Rovira, M. Mas-Torrent.  
**CrystEngComm** 18 (2016) 6149.
33. *Redox flexibility of iron complexes supported by sulfur-based tris(o-methylenethiophenolato)amine relative to its tripodal oxygen-based congener.*  
A. Mondragón, P. R. Martínez-Alanis, G. Aullón, S. Hernández-Ortega, E. Robles-Marín, M. Flores-Alamo, V. M. Ugalde-Saldivar, I. Castillo.  
**Dalton Trans.** 45 (2016) 9996.
34. *Magnetic and transport properties of Fe<sub>4</sub> single-molecule magnets: a theoretical insight.*  
N. Gallego-Planas, A. Martín-Rodríguez, E. Ruiz.  
**Dalton Trans.** 45 (2016) 18867.
35. *Transition metal carbides as novel materials for CO<sub>2</sub> capture, storage, and activation.*  
C. Kunkel, F. Viñes, F. Illas.  
**Energy Environ. Sci.** 9 (2016) 141.
36. *Synthesis and hydrolysis of alkoxy(aminoalkyl)diorganylsilanes of the formula type R<sub>2</sub>(RO)Si(CH<sub>2</sub>)<sub>n</sub>NH<sub>2</sub> (R = Allyl, n = 1-3): a systematic experimental and computational study.*  
J. Ehbets, S. Lorenzen, C. Mahler, R. Bertermann, A. Berkefeld, J. Poater, E. Fritz-Langhals, R. Weidner, F. M. Bickelhaupt, R. Tacke.  
**Eur. J. Inorg. Chem.** (2016) 1641.

37. *First-principles analysis of the charge transfer in the NMP-TCNQ molecular metal and  $(NMP)_x(Phen)_{1-x}TCNQ$  solid solutions.*  
P. Alemany, E. Canadell, J.-P. Pouget.  
**Europhys. Lett.** 113 (2016) 27006.
38. *Sequential measurement of displacement and conduction currents in electronic devices.*  
G. Albareda, F. L. Traversa, A. Benali.  
**Fluct. Noise Lett.** 15 (2016) 1640004.
39. *Theoretical modeling of the ligand-tuning effect over the transition temperature in four-coordinated Fe(II) molecules.*  
J. Cirera, E. Ruiz.  
**Inorg. Chem.** 55 (2016) 1657.
40. *Non-switching 1,2-dithienylethene-based diplatinum(II) complex showing high cytotoxicity.*  
A. Presa, L. Barrios, J. Cirera, L. Korrodi-Gregório, R. Pérez-Tomás, S. J. Teat, P. Gamez.  
**Inorg. Chem.** 55 (2016) 5356.
41. *Single-molecule magnet properties of transition-metal ions encapsulated in lacunary polyoxometalates: a theoretical study.*  
D. Aravena, D. Venegas-Yazigi, E. Ruiz.  
**Inorg. Chem.** 55 (2016) 6405.
42. *Predetermined ferromagnetic coupling via strict control of M-O-M angles.*  
M. Fondo, J. Doejo, A. M. Garcia-Deibe, J. Sanmartin-Matalobos, R. Vicente, M. S. El-Fallah, M. Amoza, E. Ruiz.  
**Inorg. Chem.** 55 (2016) 11707.
43. *Ferromagnetism in polynuclear systems based on non-linear  $[Mn^{II}_2Mn^{III}]$  building blocks.*  
J. Cirera, Y. Jiang, L. Qin, Y.-Z. Zheng, G. Li, G. Wu, E. Ruiz.  
**Inorg. Chem. Front.** 3 (2016) 1272.
44. *A trapped covalent intermediate of a glycoside hydrolase on the pathway to transglycosylation. Insights from experiments and quantum mechanics/molecular mechanics simulations.*  
L. Raich, V. Borodkin, W. Fang, J. Castro-López, D. van Aalten, R. Hurtado-Guerrero, C. Rovira.  
**J. Am. Chem. Soc.** 138 (2016) 3325.
45. *Helical folding-induced stabilization of ferromagnetic polyradicals based on triarylmethyl radical derivatives.*  
D. Reta, I. de P. R. Moreira, F. Illas.  
**J. Am. Chem. Soc.** 138 (2016) 5271.
46. *Molecular mechanisms of spin crossover in the  $\{Fe(pz)[Pt(CN)_4]\}$  metal-organic framework upon water adsorption.*  
C. H. Pham, J. Cirera, F. Paesani.  
**J. Am. Chem. Soc.** 138 (2016) 6123.

47. *Localization versus delocalization in chiral single component conductors of gold bis(dithiolene) complexes.*  
D.G. Branzea, F. Pop, P. Auban-Senzier, R. Clérac, P. Alemany, E. Canadell, N. Avarvari.  
**J. Am. Chem. Soc.** 138 (2016) 6838.
48. *Highly active Au/delta-MoC and Cu/delta-MoC catalysts for the conversion of CO<sub>2</sub>: the metal/C ratio as a key factor defining activity, selectivity, and stability.*  
S. Posada-Pérez, P. J. Ramírez, J. Evans, F. Viñes, P. Liu, F. Illas, J. A. Rodriguez.  
**J. Am. Chem. Soc.** 138 (2016) 8269.
49. *Structure of the reduced copper active site in pre-processed galactose oxidase: ligand tuning for one-electron O<sub>2</sub> activation in cofactor biogenesis.*  
R. E. Cowley, J. Cirera, M. F. Qayyum, D. Rokhsana, B. Hedman, K. O. Hodgson, D. M. Dooley, E. I. Solomon.  
**J. Am. Chem. Soc.** 138 (2016) 13219.
50. *Relaxation dynamics of identical trigonal bipyramidal cobalt molecules with different local symmetries and packing arrangements: magnetostructural correlations and ab initio calculations.*  
T. J. Woods, M. F. Ballesteros-Rivas, S. Gomez-Coca, E. Ruiz, K. R. Dunbar.  
**J. Am. Chem. Soc.** 138 (2016) 16407.
51. *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.** 333 (2016) 217.
52. *Insights from methane decomposition on nanostructured palladium.*  
S. M. Kozlov, K. M. Neyman.  
**J. Catal.** 337 (2016) 111.
53. *Comparing the catalytic activity of the water gas shift reaction on Cu(321) and Cu(111) surfaces: step sites do not always enhance the overall reactivity.*  
H. Prats, P. Gamallo, F. Illas, R. Sayós.  
**J. Catal.** 342 (2016) 75.
54. *Effects of electron transfer in model catalysts composed of Pt nanoparticles on CeO<sub>2</sub>(111) surface.*  
S. M. Kozlov, K. M. Neyman.  
**J. Catal.** 344 (2016) 507.
55. *Assessment of the sampling performance of multiple-copy dynamics versus a unique trajectory.*  
J. J. Pérez, M. S. Tomas, J. Rubio-Martinez.  
**J. Chem. Inf. Model.** 56 (2016) 1950.

56. *Consequences of electron correlation for XPS binding energies: Representative case for C(1s) and O(1s) XPS of CO.*  
P. S. Bagus, C. Sousa, F. Illas.  
**J. Chem. Phys.** 145 (2016) 144303.
57. *Performance of the TPSS functional on predicting core level binding energies of main group elements containing molecules: a good choice for molecules adsorbed on metal surfaces.*  
N. Pueyo-Bellafont, F. Viñes, F. Illas.  
**J. Chem. Theo. Comput.** 12 (2016) 324.
58. *Effect of the exchange-correlation potential on the transferability of Brønsted-Evans-Polanyi relationships in heterogeneous catalysis.*  
J. L. C. Fajín, F. Viñes, M. N. D. S. Cordero, F. Illas, J. R. B. Gomes.  
**J. Chem. Theo. Comput.** 12 (2016) 2121.
59. *Magnetic coupling constants in three electrons three centers problems from effective hamiltonian theory and validation of broken symmetry-based approaches.*  
D. Reta, I. de P. R. Moreira, F. Illas.  
**J. Chem. Theo. Comput.** 12 (2016) 3228.
60. *Effect of size and structure on the ground-state and excited-state electronic structure of TiO<sub>2</sub> nanoparticles.*  
D. Cho, K. C. Ko, O. Lamiel-Garcia, S. T. Bromley, J. Y. Lee, F. Illas.  
**J. Chem. Theo. Comput.** 12 (2016) 3751.
61. *On the zeroth-order hamiltonian for CASPT2 calculations of spin crossover compounds.*  
S. Vela, M. Fumanal, J. Ribas-Ariño, V. Robert.  
**J. Comput. Chem.** 37 (2016) 947.
62. *Complexes of adamantane-based groups 13 Lewis acids and superacids: bonding analysis and thermodynamics of hydrogen splitting.*  
M. El-Hamdi, M. Solà, J. Poater, A. T. Timoshkin.  
**J. Comput. Chem.** 37 (2016) 1355.
63. *Reaction rates in a theory of mechanochemical pathways.*  
W. Quapp, J. M. Bofill.  
**J. Comput. Chem.** 37 (2016) 2467.
64. *Analyzing slowly exchanging protein conformations by ion mobility mass spectrometry: study of the dynamic equilibrium of prolyl oligopeptidase.*  
A. López, M. Vilaseca, S. Madurga, M. Varese, T. Tarragó, E. Giralt.  
**J. Mass Spectrom.** 5 (2016) 504-511.
65. *Boron oxide glasses and nanocomposites: synthetic, structural and statistical approach.*  
H. Hristov, M. Nedyalkova, S. Madurga, V. Simeonov.  
**J. Mater. Sci. Technol.** accepted doi: 10.1016/j.jmst.2016.07.016



66. *From the  $\text{LiI}-(\text{CH}_3\text{CN})_{1-10}$  small clusters to the solvation process in acetonitrile solutions of lithium iodide.*  
M. Albertí, A. Amat, F. De Angelis, F. Pirani.  
**J. Mol. Liq.** 218 (2016) 294.
67. *Aqueous N-methylacetamide new analytic potentials and a molecular dynamics study.*  
N. Faginas-Iago, A. Lombardi, M. Albertí.  
**J. Mol. Liq.** 224 (2016) 792.
68. *Synthesis, characterization, crystal structures and computational studies on novel cyrhetrenyl hydrazones.*  
J. Gómez, N. Leiva, R. Arancibia, J. Oyarzo, G. E. Buono-Core, A. H. Klahn, V. Artigas, M. Fuentealba, R. Bosque, G. Aullón, C. López, M. Font-Bardía, T. Calvet  
**J. Organomet. Chem.** 819 (2016) 129-137.
69. *Molecular dynamics simulations of small clusters and liquid hydrogen sulfide at different thermodynamic conditions.*  
M. Albertí, A. Amat, A. Aguilar, F. Pirani.  
**J. Phys. Chem. A** 120 (2016) 4749.
70. *Dehydrohalogenation and dehydration reactions of  $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{Br}$  and  $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{OH}$  by sodium ions studied by guided ion beams techniques and quantum chemical methods.*  
E. López, J. M. Lucas, J. de Andrés, M. Albertí, J. M. Bofill, A. Aguilar.  
**J. Phys. Chem. A** 120 (2016) 4758.
71. *Adsorption of hydrogen molecules on carbon nanotubes using quantum chemistry and molecular dynamics.*  
N. Faginas-Lago, D. Yeni, F. Huarte, Y. Wang, M. Alcamí, F. Martín.  
**J. Phys. Chem. A** 120 (2016) 6451.
72. *Diffusion of  $\text{H}_2$  and  $\text{D}_2$  confined in single-walled carbon nanotubes: quantum dynamics and confinement effects.*  
M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga.  
**J. Phys. Chem. A** 120 (2016) 6501.
73. *Near-edge X-ray absorption fine structure investigation of the quasi-one-dimensional organic conductor  $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$ .*  
K. Medjanik, A. Chernenkaya, X. Kozina, S. A. Nepijko, G. Öhrwall, P. Foury-Leylekian, P. Alemany, G. Schönhense, E. Canadell, J.-P. Pouget.  
**J. Phys. Chem. A** 120 (2016) 8574.
74. *Reaction coordinates and pathways of mechanochemical transformations.*  
W. Quapp, J. M. Bofill.  
**J. Phys. Chem. B** 120 (2016) 2644.
75. *Structure and properties of zirconia nanoparticles from density functional theory calculations.*  
A. Ruiz-Puigdollers, F. Illas, G. Pacchioni.  
**J. Phys. Chem. C** 120 (2016) 4392.

76. *Atomically dispersed Pd, Ni and Pt species in ceria-based catalysts: Principal differences in stability and reactivity.*  
A. Neitzel, A. Figueroba, Y. Lykhach, T. Skála, M. Vorokhta, N. Tsud, S. Mehl, K. Ševčíková, K. C. Prince, K. M. Neyman, V. Matolín, J. Libuda.  
**J. Phys. Chem. C** 120 (2016) 9852.
77. *Effect of nanostructuring on the reactivity of zirconia: a DFT plus U study of Au atom adsorption.*  
A. Ruiz-Puigdollers, F. Illas, G. Pacchionni.  
**J. Phys. Chem. C** 120 (2016) 17604.
78. *Stabilization of small platinum nanoparticles on Pt-CeO<sub>2</sub> thin film electrocatalysts during methanol oxidation.*  
O. Brummel, F. Waidhas, F. Faisal, R. Fiala, M. Vorokhta, I. Khalakhan, M. Dubau, A. Figueroba, G. Kovács, H. A. Aleksandrov, G. N. Vayssilov, S. M. Kozlov, K. M. Neyman, V. Matolín, J. Libuda.  
**J. Phys. Chem. C** 120 (2016) 19723.
79. *Evidence for multi-polymorphic islands during epitaxial growth of ZnO on Ag(111).*  
I. Demiroglu, S. T. Bromley.  
**J. Phys.: Condens. Matter** 28 (2016) 224007.
80. *Local energy and power in many-particle quantum systems driven by an external electrical field.*  
G. Albareda, F. L. Traversa, X. Oriols.  
**J. Stat. Mech. Theo. Exp.** 5 (2016) 054026.
81. *Lipid vesicle interaction with hydrophobic surfaces: a coarse-grained molecular dynamics study.*  
I. Mannelli, F. Sagués, V. Pruneri, R. Reigada.  
**Langmuir** 32 (2016) 12632.
82. *Disclosing the ligand- and solvent-induced changes on the spin transition and optical properties of Fe(II)-indazolyipyridine complexes.*  
S. Vela, C. Gourlaouen, M. Fumanal, J. Ribas-Ariño.  
**Magnetochemistry** 2 (2016) 6.
83. *Enzymatic cleavage of glycosidic bonds: strategies on how to setup and control a QM/MM metadynamics simulation.*  
L. Raich, A. Nin-Hill, A. Ardèvol, C. Rovira.  
**Methods Enzymol.** 577 (2016) 159.
84. *Large conductance switching in a single-molecule device through room temperature spin-dependent transport.*  
A. C. Aragones, D. Aravena, J. I. Cerda, Z. Acis-Castillo, H. Li, J. A. Real, F. Sanz, J. Hihath, E. Ruiz, I. Diez-Perez  
**Nano Lett.** 16 (2016) 218.

85. *Exchange coupling inversion in a high-spin organic triradical molecule.*  
R. Gaudenzi, E. Burzuri, D. Reta, I. de P. R. Moreira, S. T. Bromley, C. Rovira, J. Veciana, H. S. J. van der Zant.  
**Nano Lett.** 16 (2016) 2066.
86. *Electrostatic catalysis of a Diels–Alder reaction.*  
A. C. Aragonès, N. L. Haworth, N. Darwish, S. Ciampi, N. J. Bloomfield, G. G. Wallace, I. Diez-Perez, M. L. Coote.  
**Nature** 531 (2016) 88.
87. *Unexpected mechanochemical complexity in the mechanistic scenarios of disulfide bond reduction in alkaline solution.*  
P. Dopieralski, J. Ribas-Ariño, P. Anjukandi, M. Krupicka, D. Marx.  
**Nature Chem.** (2016) doi: 10.1038/nchem.2632
88. *Counting electrons on supported nanoparticles.*  
Y. Lykhach, S. M. Kozlov, T. Skála, A. Tovt, V. Stetsovych, N. Tsud, F. Dvorák, V. Johánek, A. Neitzel, J. Myslivecek, S. Fabris, V. Matolín, K. M. Neyman, J. Libuda.  
**Nature Mater.** 15 (2016) 284.
89. *Simultaneous and coordinated rotational switching of all molecular rotors in a network.*  
Y. Zhang, H. Kersell, R. Stefak, J. Echeverría, V. Iancu, U. G. E. Perera, Y. Li, A. Deshpande, K.–F. Braun, C. Joachim, G. Rapenne, S.–W. Hla.  
**Nature Nanotechnol.** 11 (2016) 706.
90. *Size and shape trump charge in interactions of oxovanadates with self-assembled terraces: application of continuous shape measure analysis to the decavanadate anion.*  
I. Sanchez-Lombardo, B. Baruah, S. Alvarez, K. R. Werst, N. A. Segaline, N. E. Levinger, D. C. Crans.  
**New J. Chem.** 40 (2016) 962.
91. *Pyridinethiolate titanocene metalloligands and their self-assembly reactions to yield early-late metallamacrocycles.*  
M. Ferrer, D. Gómez-Bautista, A. Gutiérrez, G. Orduna-Marco, L. A. Oro, J. J. Pérez-Torrente, O. Rossell, E. Ruiz.  
**Organometallics** 35 (2016) 336.
92. *Mechanistic investigation of iridium-catalyzed C–H borylation of methyl benzoate: Ligand effects in regioselectivity and activity.*  
J. Jover, F. Maseras.  
**Organometallics** 35 (2016) 3221.
93. *Selective derivatization of N-terminal cysteines using cyclopentenediones.*  
O. Brun, J. Agramunt, L. Raich, C. Rovira, E. Pedroso, A. Grandas.  
**Org. Lett.** 18 (2016) 4836.
94. *FMOC-RGDS based fibrils: atomistic details of their hierarchical assembly.*  
D. Zanuy, J. Poater, M. Solà, I. Hamley, C. Alemán.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 18 (2016) 1265.

95. *Quantum dynamics of the pick up process of atoms by superfluid helium nanodroplets: the Ne + (<sup>4</sup>He)<sub>1000</sub> system.*  
A. Vilà, M. González, R. Mayol.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 18 (2016) 2016.
96. *Relaxation dynamics of helium nanodroplets after photodissociation of a dopant homonuclear diatomic molecule. The case of Cl<sub>2</sub>@(<sup>4</sup>He)<sub>N</sub>.*  
A. Vilà, M. González, R. Mayol.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 18 (2016) 2409.
97. *Unexpectedly large impact of van der Waals interactions on the description of heterogeneously catalyzed reactions: the water gas shift reaction on Cu(321) as a case example.*  
H. Prats, P. Gamallo, R. Sayós, F. Illas.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 18 (2016) 2792.
98. *Paramagnetic spherical nanoparticles by the self-assembly of persistent trityl radicals.*  
I. Marin-Montesinos, J. C. Paniagua, A. Peman, M. Vilaseca, F. Luis, S. Van Doorslaer, M. Pons.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 18 (2016) 3151.
99. *Reactivity of atomically dispersed Pt<sup>2+</sup> species towards H<sub>2</sub>: Model Pt-CeO<sub>2</sub> fuel cell catalysts.*  
Y. Lykhach, A. Figueroba, M. F. Camellone, A. Neitzel, T. Skála, F. R. Negreiros, M. Vorokhta, N. Tsud, K. C. Prince, S. Fabris, K. M. Neyman, V. Matolín, J. Libuda.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 18 (2016) 7672.
100. *Octahedral aromaticity in <sup>2S+1</sup>A<sub>1g</sub> X<sub>6</sub><sup>q</sup> clusters (X = Li-C and Be-Si, S = 0-3, and q = -2 to +4).*  
O. El-Bakouri, M. Duran, J. Poater, F. Feixas, M. Solà.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 18 (2016) 11700.
101. *Performance of a modified hybrid functional in the simultaneous description of stoichiometric and reduced TiO<sub>2</sub> polymorphs.*  
K. C. Ko, O. Lamiel-Garcia, J. Y. Lee, F. Illas.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 18 (2016) 12357.
102. *Impact of the water dimer on the atmospheric reactivity of carbonyl oxides.*  
J. M. Anglada, A. Solé.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 18 (2016) 17698.
103. *The quest for rationalizing the magnetism in purely organic semiquinone-bridged bisdithiazolyl molecular magnets.*  
M. Fumanal, M. Deumal.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 18 (2016) 20738.
104. *Planar vs. three-dimensional X<sub>6</sub><sup>2-</sup>, X<sub>2</sub>Y<sub>4</sub><sup>2-</sup>, and X<sub>3</sub>Y<sub>3</sub><sup>2-</sup> (X, Y = B, Al, Ba) metal clusters: an analysis of their relative energies through the turn-upside-down approach.*  
O. El-Bakouri, M. Solà, J. Poater.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 18 (2016) 21102.

105. *Can the state of platinum species be unambiguously determined by the stretching frequency of adsorbed CO probe molecule?*  
H. A. Aleksandrov, K. M. Neyman, K. I. Hadjiivanov, G. N. Vayssilov.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 18 (2016) 22108.
106. *Single oxygen vacancies of (TiO<sub>2</sub>)<sub>35</sub> as a prototype reduced nanoparticle: implication for photocatalytic activity.*  
S. Kim, K. C. Ko, J. Y. Lee, F. Illas.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 18 (2016) 23755.
107. *Under what conditions does (SiO)<sub>N</sub> nucleation occur? A bottom-up kinetic modelling evaluation.*  
S. T. Bromley, J. C. Gómez Martín, J. M. C. Plane.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 18 (2016) 26913.
108. *Mass effects in the photodissociation of homonuclear diatomic molecules in helium nanodroplets: inelastic collision and viscous flow energy exchange regimes.*  
A. Vilà, M. González.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 18 (2016) 27630.
109. *Reaction dynamics inside superfluid helium nanodroplets: the formation of the Ne<sub>2</sub> molecule from Ne + Ne@(<sup>4</sup>He)<sub>N</sub>.*  
A. Vilà, M. González.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 18 (2016) 31869.
110. *The reaction mechanism of polyalcohol dehydration in hot pressurized water.*  
S. Ruiz-Barragan, J. Ribas-Ariño, M. Shiga.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 18 (2016) 32438.
111. *Universal steps in quantum dynamics with time-dependent potential-energy surfaces: beyond the born-oppenheimer picture.*  
G. Albareda, A. Abedi, I. Tavernelli, A. Rubio.  
**Phys. Rev. A** 94 (2016) 062511.
112. *Equilibrium microphase separation in the two-leaflet model of lipid membranes.*  
R. Reigada, A. S. Mikhailov.  
**Phys. Rev. E** 93 (2016) 010401(R).
113. *Atomic and molecular collisional data for spacecraft re-entry plasmas.*  
R. Celiberto, I. Armenise, M. Cacciatore, M. Capitelli, F. Esposito, P. Gamallo, R. K. Janev, A. Laganà, V. Laporta, A. Laricchiuta, A. Lombardi, M. Rutigliano, R. Sayós, J. Tennyson, J. M. Wadehra.  
**Plasma Sources Sci. Technol.** 25 (2016) 033004.
114. *Antiferro- to ferromagnetic crossover in diphenoxido bridged Ni<sup>II</sup><sub>2</sub>Mn<sup>II</sup> complexes derived from N<sub>2</sub>O<sub>2</sub> donor Schiff base ligands.*  
P. Seth, A. Figuerola, J. Jover, E. Ruiz, A. Ghosh.  
**Polyhedron** 117 (2016) 59.

115. *Self-assembly of discrete metallocycles versus coordination polymers based on Cu(I) and Ag(I) ions and flexible ligands: structural diversification and luminescent properties.*  
J. Vallejos, I. Brito, A. Cárdenas, M. Bolte, S. Conejeros, P. Alemany, J. Llanos.  
**Polymers** 8 (2016) 46.
116. *Steering the formation of supported Pt-Sn nanoalloys by reactive metal-oxide interaction.*  
A. Neitzel, G. Kovács, Y. Lykhach, N. Tsud, S. M. Kozlov, T. Skála, M. Vorokhta, V. Matolín, K. M. Neyman, J. Libuda.  
**RSC Adv.** 6 (2016) 85688.
117. *Fractal dimension of the trajectory of a single particle diffusing in crowded media.*  
L. Pitulice, D. Craciun, E. Vilaseca, S. Madurga, I. Pastor, F. Mas, A. Isvoran.  
**Romanian Journal of Physics** 61 (2016) 1276-1286.
118. *Exchange interactions on the highest-spin reported molecule: the mixed-valence Fe<sub>42</sub> complex.*  
D. Aravena, D. Venegas-Yazigi, E. Ruiz  
**Sci. Rep.** 6 (2016) 23847.
119. *Alteration of interleaflet coupling due to compounds displaying rapid translocation in lipid membranes.*  
R. Reigada.  
**Sci. Rep.** 6 (2016) 32934.
120. *Tuning the electrical conductance of metalloporphyrin supramolecular wires.*  
M. Noori, A. C. Aragonès, G. Di Palma, N. Darwish, S. W. D. Bailey, Q. Al-Galiby, I. Grace, D. B. Amabilino, A. González-Campo, I. Díez-Pérez, C. J. Lambert.  
**Sci. Rep.** 6 (2016) 37352.
121. *How carbo-benzenes fit molecules in their inner core as do biologic ion carriers.*  
F. Turias, J. Poater, R. Chauvin, A. Poater.  
**Struct. Chem.** 27 (2016) 249.
122. *On the hydrogen adsorption and dissociation on Cu surfaces and nanorows.*  
L. Álvarez-Falcón, F. Viñes, A. Notario-Estevez, F. Illas.  
**Surf. Sci.** 646 (2016) 221.
123. *DFT approaches to transport calculations in magnetic single-molecule devices.*  
A. Martín-Rodríguez, D. Aravena, E. Ruiz.  
**Theor. Chem. Acc.** 135 (2016) 1.
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.** 134 (2016) 11.
125. *Performance of Minnesota functionals on predicting core-level binding energies of molecules containing main-group elements.*  
N. Pueyo-Bellafont, G. Alvarez-Saiz, F. Viñes, F. Illas.  
**Theor. Chem. Acc.** 135 (2016) 35.

126. *A contribution to a theory of mechanochemical pathways by means of Newton trajectories.*  
W. Quapp, J. M. Bofill.  
**Theor. Chem. Acc.** 135 (2016) 113.
127. *A force field for acetone: the transition from small clusters to liquid phase investigated by molecular dynamics simulations.*  
N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Lombardi.  
**Theor. Chem. Acc.** 135 (2016) 161.
128. *The contact of graphene with Ni(111) surface: description by modern dispersive forces approaches.*  
H. Muñoz-Galán, F. Viñes, J. Gebhardt, A. Görling, F. Illas.  
**Theor. Chem. Acc.** 135 (2016) 165.
129. *Exploring the validity of the Glidewell-Lloyd extension of Clar's pi-sextet rule: assessment from polycyclic aromatic hydrocarbons.*  
O. El-Bakouri, J. Poater, F. Feixas, M. Solà.  
**Theor. Chem. Acc.** 135 (2016) 205.

## CAPÍTOLS DE LLIBRES I PROCEEDINGS

1. *QM/MM calculations on selectivity in homogeneous catalysis*  
J. Jover, F. Maseras.  
**Structure and Bonding** 167 (2016) 59
2. *Comparison of the Cr-Cr quadruple and quintuple bonding mechanisms*  
A. Falceto, S. Alvarez.  
**Structure and Bonding** 170 (2016) 249
3. *Modeling Magnetic Properties with Density Functional Theory-Based Methods*  
J. Cirera, E. Ruiz.  
**Molecular Magnetic Materials** edited by B. Sieklucka and D. Pinkowicz (2016), 417, Wiley-VCH.
4. *Ab Initio Wavefunction Approaches to Spin States*  
C. Sousa, C. de Graaf.  
**Spin States in Biochemistry and Inorganic Chemistry. Influence on Structure and Reactivity** (2016) Wiley.
5. *An Application of the Maximum Principle in Chemistry: A Method to Locate Transition States*  
J. M. Bofill, W. Quapp.  
**Theoretical & Quantum Chemistry at the Dawn's End of 21st Century** edited by R. Carbó-Dorca and T. Chakraborty (2016) Taylor & Francis Group, London.
6. *Electron Devices Simulation with Bohmian Trajectories*  
G. Albareda, D. Marian, A. Benali, A. Alarcón, S. Moises, X. Oriols.  
**Simulation of Transport in Nanodevices** edited by F. Triozon and P. Dollfus (2016) ISTE Ltd., Wiley & Sons Inc.
7. *Rules of aromaticity*  
F. Feixas, E. Matito, J. Poater, M. Solà.  
**Challenges and advances in computational chemistry and physics** edited by R. Chauvin, C. Lepetit, B. Silvi and E. Alikhani (2016) Springer.
8. *QM/MM simulations of Au nanoclusters and glutathione ligands in water solvent*  
V. Rojas-Cervellera, C. Rovira, J. Akola.  
**Proceedings of the 16<sup>th</sup> International Conference on Computational and Mathematical Methods in Science and Engineering, CMMSE** (2016).
9. *Unraveling enzymatic mechanisms by means of computational tools: biotechnological implications in the study of glycosidases*  
L. Raich, C. Rovira.  
**Revista de la Societat Catalana de Química** 15 (2016) 9.



10. *Modeling reactivity in metalloproteins: hydrogen peroxide decomposition by heme enzymes*  
M. Alfonso-Prieto, C. Rovira.  
**Simulating Enzyme Reactivity**, 15 (2016) 453 Royal Society of Chemistry, Cambridge.
11. *Acetone clusters Molecular Dynamics using a semiempirical intermolecular potential*  
N. Faginas-Lago, M. Albertí, A. Lombardi.  
**Lecture Notes in Comput. Sci.** 9786 (2016) 129.

### III.3 ALTRES ACTIVITATS

#### TESIS DOCTORALS 2016

---

1. *Estudio teórico de enlaces no clásicos.*  
**Andrés Falceto Palacín**  
Director/s: S. Alvarez.  
Doctorat en Química Inorgànica Molecular.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Desembre 2016.
2. *Computational Study of the Mechanisms that Stabilize Organic Molecule-Based Magnets.*  
**Maria Pilar Lafuente Hernández**  
Director/s: M. Deumal, J. J. Novoa.  
Doctorat en Química Teòrica i Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Desembre 2016.
3. *Understanding and predicting magnetic coupling in complex systems: from inorganic complexes to organic polyradicals.*  
**Daniel Reta Mañeru**  
Director/s: I. de P. R. Moreira, F. Illas.  
Doctorat en Química Teòrica i Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Gener 2016.

#### MÀSTERS 2016

---

1. *Catalytic reaction of  $\beta$ -galactocerebrosidase investigated by QM/MM ab initio metadynamics*  
**Alba Nin Hill**  
Director/s: C. Rovira.  
Màster Europeu en Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2016.
2. *Single-molecule electronic transport through transition metal complexes.*  
**Alejandro Martín Rodríguez**  
Director/s: E. Ruiz.  
Màster Europeu en Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2016.

3. *Toward a drug design that selective activate the pro-apoptotic bax protein using multiple representative structures.*  
**Anna Cebrián Prats**  
Director/s: J. Rubio.  
Màster Europeu en Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2016.
4. *Estudi del rendiment i aplicabilitat del Force Field FFSiOH per a clústers de silica amb diferents graus d'hidroxilació.*  
**Antoni Macià Escatllar**  
Director/s: S. Bromley.  
Màster Europeu en Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2016.
5. *Study of the spin interactions and magnetism in  $Cu(hfac)_2L^R$  ( $L^R$ =butil-pirazolyl nitronyl nitroxide) "breathing crystal".*  
**Cristina Roncero Barrero**  
Director/s: M. Deumal.  
Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2016.
6. *Conditional Wave Function approach to ab-initio molecular and electron dynamics.*  
**Efrem Bernuz Fitó**  
Director/s: G. Albareda, J. M. Bofill.  
Màster Europeu en Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2016.
7. *Estudio computacional del efecto del disolvente en la transición de espín de los sistemas  $[Fe(E-dpsp)_2](BF_4)_2$ ·acetona y  $[Fe(E-dpsp)_2](BF_4)_2$ ·PC*  
**Fernando Jiménez Grávalos**  
Director/s: J. Ribas.  
Màster Europeu en Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2016.
8. *Modelització de l'intermedi de reacció en quitinases.*  
**Joan Coines López-Nieto**  
Director/s: C. Rovira, X. Biarnés.  
Màster en Bioenginyeria.  
Institut Químic de Sarrià, Universitat Ramon Llull.  
Juliol 2016.

9. *Development of a Brownian Dynamics simulation code for enzymatic reaction-diffusion processes in crowded intracellular environments.*  
**Mireia Via Nadal**  
Director/s: S. Madurga, F. Mas.  
Màster Europeu en Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2016.
  
10. *The effect of macromolecular crowding on oligomeric enzyme kinetics: Negative cooperativity on GDH.*  
**Núria Vilaplana Lopera**  
Director/s: F. Mas, C. Balcells.  
Màster en Biotecnologia Molecular.  
Facultat de Farmàcia, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2016.
  
11. *Brownian Dynamics simulation of macromolecule diffusion in intracellular media.*  
**Pablo M. Blanco Andrés**  
Director/s: S. Madurga.  
Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2016.



## PARTICIPACIÓ A CONGRESSOS 2016

---

### **251<sup>st</sup> ACS National Meeting & Exposition - Computers in Chemistry**

San Diego (EUA), 13 – 17 març 2016

*Aromaticity criteria based on electron delocalization measures (comunicació oral)*

J. Poater

*Role of hydrogen bonding, pi-pi stacking interactions, twist angle, and solvation on B-DNA (comunicació oral)*

J. Poater

*Close connection between pi aromaticity of hydrocarbons and three-dimensional aromaticity of closo boron hydrides (comunicació oral)*

J. Poater

### **252<sup>nd</sup> ACS National Meeting & Exposition – Chemistry of the people, by the people, for the people**

Philadelphia (EUA), 21 – 25 agost 2016

*How carbohydrate active enzymes work. Insights from QM/MM simulations (comunicació oral)*

C. Rovira

### **2<sup>nd</sup> Advances in Crystal Engineering**

Barcelona (Espanya), 15 gener 2016

J. J Novoa (organització del congrés)

### **1<sup>st</sup> Aerospace Thematic Workshop EUCASS - Fundamentals of Collisions of Fast Particles with Surfaces – ATW2016**

Aussois (França), 11 – 16 setembre 2016

*Gas surface processes on re-entry heat shields (comunicació convidada)*

P. Gamallo

### **67<sup>th</sup> Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry**

The Hague (Països Baixos), 21 – 26 agost 2016

*Studying chemical reactions at the nanoscale (comunicació oral)*

A. C. Aragonès, N. Darwish, S. Ciampi, M. Coote, I. Díez-Pérez

*Studying charge transport in Single-Protein wires (comunicació oral)*

M. Pozuelo-Ruiz, J. M. Artés, F. Sanz, P. Gorostiza, I. Díez-Pérez

**Annual User Meeting of the Spanish Supercomputing Network (Red Española de Supercomputación)**

León (Espanya), 20 setembre 2016

*Computational design of advanced nanoalloy materials (conferència convidada)*

K. M. Neyman, G. Kovács, S. M. Kozlov

**CECAM Workshop: Different Routes to Quantum Molecular Dynamics**

Lausanne (Suïssa), 6 – 10 juny 2016

G. Albareda (organització del congrés)

*Towards ab-initio molecular dynamics without Born-Oppenheimer potential-energy surfaces (comunicació oral)*

G. Albareda, A. Abedi, I. Tavernelli, A. Rubio

**CECAM Workshop: Towards a Common Format for Computational Materials Science Data**

Laussane (Suïssa), 25 gener – 5 febrer 2016

*Additional properties a quantum chemist will like to find in NOMAD (comunicació oral)*

F. Illas

**CECAM Workshop: Structure prediction of nanoclusters from global optimization techniques: computational strategies and connection to experiments**

Pau (França), 5 – 8 juliol 2016

*Global optimisation of silicon oxide clusters (comunicació oral)*

S. T. Bromley

**IV Congreso Nacional de Nanotecnología 2016**

Olmué (Chile), 5 – 7 setembre 2016

*Probing new concepts in single-molecule wires: diode, electromechanics, transistor, magnetoresistance, photoswitching and chemical reactivity (comunicació oral)*

I. Díez-Pérez

**EMRS 2016 Spring Meeting**

Lille (França), 2 – 6 maig 2016

*Design of open-shell 2D covalent materials with controllable properties (comunicació oral)*

S. T. Bromley, I. Alcón

**4<sup>th</sup> Energy Materials Workshop of the Thomas Young Centre and TOUCAN International conference Shaping Nanocatalysts**

Londres (Regne Unit), 14 – 16 desembre 2016

*Sophisticated computational design of bimetallic nanocrystallites (conferència convidada)*

K. M. Neyman, G. Kovács, S. M. Kozlov

K. M. Neyman (chairman)

**ESPA2016: 10th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications**

Castelló de la Plana (Espanya), 28 juny – 1 juliol 2016

*On the mechanism of bistability in molecule-based magnets: the prototype PDTA case (pòster)*

T. Francese, M. Deumal, J. Ribas-Ariño, J.J. Novoa

*How carbohydrate-active enzymes work (comunicació oral)*

C. Rovira

**6th EuCheMS Chemistry Congress**

Sevilla (Espanya), 11-15 setembre 2016

*Selective capture and separation of industrial post-combustion gases using zeolites: a theoretical approach (pòster)*

H. Prats, G. Alonso, D. Bahamón, X. Giménez, R. Sayós, P. Gamallo

*Effect of impurities in CO<sub>2</sub> capture with Mg-MOF-74 and their role in swing adsorption processes (pòster)*

X. Giménez, F. Keshavarz, D. Bahamón, P. Gamallo, R. Sayós

*Kinetic Monte Carlo study of the water gas shift reaction on Cu (321) surface based on density functional theory data (comunicació oral keynote)*

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

*Dihydrogen interactions in alkanes (comunicació oral)*

J. Echeverría

*Aromaticity: A complex concept which may be made understood to the public (comunicació oral)*

M. Duran, S. Simon, M. Solà, J. Poater

**1st European Conference of Molecular Spintronics**

Bologna (Itàlia), 15-18 novembre 2016

*Magnetoresistance in single-molecule devices based on magnetic mononuclear transition metal complexes (comunicació oral)*

E. Ruiz

**European Conference on Laboratory Astrophysics – Gas on the Rocks - ECLA 2016**

Madrid (Espanya), 21 – 25 novembre 2016

*Silicate dust: a bottom-up computational approach (comunicació oral)*

S. T. Bromley



**21<sup>st</sup> European Conference on the Dynamics of Molecular Systems - MOLEC 2016**

Toledo (Espanya), 11 – 16 setembre 2016

*Environmentally relevant ion-molecule processes: Non-adiabatic collisions in ground state N<sub>2</sub>O and CO molecules with Na<sup>+</sup> and Li<sup>+</sup> in the 0,10-5,00 keV energy range (pòster)*

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

*Radio Frequency Ion Beams (RF-GIB) study of ion-molecule reactions having environmental, astrochemical and prebiological relevance at the few eV energy range (pòster)*

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

**European Graphene Forum - EGF 2016**

Paris (França), 1-3 juny 2016

*Graphynes: from competitors to graphene to atomic sieves and scatters (comunicació oral)*

F. Viñes, M. Manadé, S. Kim, P. Gamallo, J.Y. Lee, F. Illas

**Excited State Simulations: Bridging Scales workshop**

Marsella (França), 7 – 10 novembre 2016

*Computational modeling of organometallic iridium(III) triplet emitters (pòster)*

C. Climent, D. Casanova, P. Alemany

**Fachbeirat (scientific advisory board Meeting) of the Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter**

Hamburg (Alemanya), 9 – 11 març 2016

*Towards ab-initio molecular dynamics without Born-Oppenheimer potential-energy surfaces (comunicació oral)*

G. Albareda, A. Abedi, I. Tavernelli, A. Rubio

**Fotofuel – Summer School**

Almeria (Espanya), 25 – 27 octubre 2016

*Theoretical modelling of light harvesting materials (comunicació oral)*

F. Viñes

**Festival of Genomics**

Londres (Regne Unit), 19 – 21 gener 2016

*Chemical basis for the recognition of trimethyllysine by epigenetic reader proteins (pòster)*

J. Poater, F. M. Bickelhaupt, J. Mecinovic

**funCOS**

Erlangen (Alemanya), 29 juliol 2016

*Theoretical modelling of catalytic materials and their reactivity: as simple as possible, but not simpler (conferència convidada)*

K. M. Neyman

**115<sup>th</sup> General Assembly of the German Bunsen Society for Physical Chemistry, Bunsentagung 2016**

Rostock (Alemanya), 5-7 maig 2016

*Low platinum group metal fuel cell catalysts: from surface science to in-situ spectroelectrochemistry (comunicació oral)*

O. Brummel, F. Waidhas, F. Faisal, M. Vorokhta, I. Khalakhan, G. Kovács, S. Kozlov, K. M. Neyman, V. Matolin, J. Libuda.

**General Assembly meeting of the FP7 project ChipCAT Design of Thin-Film Nanocatalysts for On-Chip Fuel Cell Technology**

Praga (República Txeca), 9 – 10 maig 2016

*Progress report on the work package 2 “Computational modelling” (comunicació oral)*

K. M. Neyman

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

Osnabrück (Alemanya), 6 – 8 abril 2016

*Modeling interactions of transition metals with ceria nanoparticles: applications for fuel cell technologies (pòster)*

A. Figueroba, K. M. Neyman

*Modelling of ceria-based nanostructured inspired by the action CM1104 (comunicació oral)*

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

*Metal-oxide interactions in Pt/CeO<sub>2</sub> catalysts and related phenomena (comunicació oral)*

Y. Lykhach, S. M. Kozlov, A. Bruix, G. N. Vayssilov, T. Skála, A. Tovt, N. Tsud, V. Stetsovych, F. Dvořák, V. Johánek, A. Neitzel, J. Myslivecek, I. Matolínová, M. Vorokhta, K. Ševčíková, R. Fiala, M. Václavu, K. C. Prince, S. Bruyère, V. Potin, A. Migani, T. Staudt, G.P. Petrova, F. Illas, S. Fabris, V. Matolín, K.M. Neyman, J. Libuda

**12<sup>th</sup> German Conference on Chemoinformatics**

Fulda (Alemanya), 6-8 novembre 2016

*The “NOMAD (novel materials discovery) center of excellence”: challenges and solutions to build a code-independent data base for computational materials science and its implication in computational chemistry (comunicació oral)*

F. Illas

**Girona Seminar. Predictive catalysis: Transition-metal reactivity by design**

Girona (Espanya), 17 – 20 abril 2016

*Electronic structure and reactivity of donor-stabilized bis(amididinato/guanidinato) silylenes (pòster)*

J. Poater, C. F. Guerra, F. M. Bickelhaupt, R. Tacke

**High Dimensional Quantum Dynamics – challenges and opportunities**

Rostok (Alemanya), 31 agost – 3 setembre 2016

*Diabatization of the H<sub>2</sub>@SWNT system within the MCTDH approach: circumventing potential energy matrix calculations (oral communication)*

M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga

**HPC Materials Chemistry Consortium**

Cardiff (Regne Unit), 16 novembre 2016

*From building blocks to bulk: design and understanding of nanostructured materials from the bottom-up (comunicació oral)*

S. T. Bromley

**Interfaces Against Pollution - IAP2016**

Lleida (Espanya), 4 – 7 setembre 2016

*Functionalized surfaces with tailored wettability determine influenza A infectivity (pòster)*

I. Mannelli, R. Reigada

*One century of the Langmuir adsorption isotherm (pòster)*

F. Mas, C. Rey-Castro

*Dealing with electrostatic interactions in the determination of ion binding properties of polyelectrolytes. Extension of the transfer matrix formalism to the full range of ionic strengths (pòster)*

J.L. Garcés, S. Madurga, C. Rey-Castro, F. Mas

F. Mas (comitè organitzador)

**42<sup>nd</sup> International Conference on Coordination Chemistry**

Brest (França), 3 – 8 juliol 2016

*Transport properties of single-molecule devices showing room temperature magnetoresistance (conferència convidada)*

E. Ruiz

*Computational modeling of the ligand tuning effect over the transition temperature in spin-crossover systems (comunicació oral)*

J. Cirera, E. Ruiz

*Disentangling a long lasting issue: which is the magnetic dimensionality of the Cu<sub>2</sub>(1,4-diazacycloheptane)<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub> crystal? (comunicació oral)*

J. Jornet-Somoza, F. Cosi, M. Fumanal, M. Deumal

**X International Conference on Mechanisms of Catalytic Reactions, School-Symposium on Quantum-mechanical modelling of catalytic processes**

Svetlogorsk (Rússia), 2 – 6 octubre 2016

*Innovative computational design of advanced nanoalloy materials for catalysis and beyond (conferència convidada)*

K. M. Neyman

K. M. Neyman (chairman)

**8<sup>th</sup> International Conference on Molecular Electronics - ElecMol 2016**

Paris (França), 22 – 26 agost 2016

*New fundamental effects in single-molecule circuitry (comunicació oral)*

A. C. Aragonès, N. Darwish, F. Sanz, I. Díez-Pérez

**15<sup>th</sup> International Conference on Molecule-Based Magnets - ICMM2016**

Sendai (Japó), 4 – 8 setembre 2016

*On the mechanism of bistability in three dithiazolyl molecule-based magnetic crystals (pòster)*

T. Francese, M. Deumal, J. Ribas-Ariño, J. J. Novoa

*Magnetoresistance at room temperature in single-molecule porphyrin-based devices (comunicació oral)*

E. Ruiz

**16<sup>th</sup> International Conference on Theoretical Aspects of Catalysis - ICTAC-16**

Zakopane (Polònia), 19 – 23 juny 2016

*Transition metal carbides based catalysts for CO<sub>2</sub> conversion: computational modeling and experiments (conferència convidada)*

S. Posada-Perez, F. Viñes, J. A. Rodriguez, P. Liu, D. J. Stacchiola, P. J. Ramírez, R. A. Gutiérrez, F. Illas

*Computationally designed nanoparticle as advanced models of bimetallic catalysts (conferència convidada)*

K. M. Neyman

K. M. Neyman (chairman)

**16<sup>th</sup> International Congress on Catalysis – ICC 2016**

Beijing (Xina), 3 – 8 juliol 2016

*Metal-carbide synergism in heterogeneous catalysis: an overview (comunicació oral)*

F. Viñes, P. Liu, J. A. Rodriguez, F. Illas

*Efficient in-silico design of advanced nanoalloy materials for catalysis and related applications (conferència convidada)*

K. M. Neyman, G. Kovács, S. M. Kozlov

**International Focus Workshop on Bridging-Time Scale Techniques and their Applications in Atomistic Computational Science**

Dresden (Alemanya), 12 – 15 setembre 2016

*The variational nature of some reaction path models (comunicació oral)*

J. M. Bofill, W. Quapp

*The use of Newton trajectories in mechanochemistry and catalysis (comunicació oral)*

W. Quapp, J. M. Bofill

**18<sup>th</sup> International Symposium on Small Particles and Inorganic Clusters - ISSPIC**

Jyväskylä (Finlàndia), 14 – 19 agost 2016

*Computational engineering of bimetallic nanocrystals with tailor-made atomic ordering (comunicació oral)*

S. M. Kozlov, K. M. Neyman, G. Kovács, Z. Cao, L. Falivene, L. Cavallo

**International Symposium on Single-Atom Catalysts**

Dalian (Xina), 30 juny – 2 juliol 2016

*Materials for single-atom catalysis based on nanostructured ceria: Density-functional modelling (comunicació convidada)*

K. M. Neyman

K. M. Neyman (chairman)

**7<sup>th</sup> IQTCUB Symposium**

Barcelona (Espanya), 10 juny 2016

*Single molecule motors working on surface (conferència convidada)*

J. Echeverría

*Adsorption and separation of post-combustion gases with Mg-MOF-74 (pòster)*

F. Keshavarz, X. Giménez, D. Bahamón, P. Gamallo, R. Sayós

*Nomad, the novel materials discovery laboratory (conferència convidada)*

R. Valero, A. H. Larsen, S. T. Bromley, F. Illas

*Using open-shell molecules to design 2D covalent networks with controllable properties (pòster)*

I. Alcón, S. T. Bromley, F. Illas

*Selective capture and separation of industrial post-combustion gases with FAU-type zeolites: a computational study (pòster)*

H. Prats, G. Alonso, D. Bahamón, X. Giménez, P. Gamallo, R. Sayós

*Stability of ZnO nanoparticles as function of shape and size (pòster)*

O. Lamiel-García, F. Viñes, F. Illas, S. T. Bromley

*Performance of density functional theory based methods in predicting core level binding energies and the physical meaning of Khon-Sham energies (pòster)*

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

*Highly active Cu/ $\beta$ -Mo<sub>2</sub>C and Cu/ $\delta$ -MoC catalysts for the conversion of CO<sub>2</sub>: The metal/C ratio as a key factor defining activity, selectivity, and stability (pòster)*

S. Posada-Pérez, P. J. Ramírez, J. Evans, F. Viñes, P. Liu, F. Illas, J. A. Rodriguez

*Graphene interaction with Ni(111) described by modern dispersive forces (pòster)*

H. Muñoz-Galán, F. Viñes, J. Gebhardt, A. Görling, F. Illas

*A conditional wave function approach to reactive scattering (pòster)*

E. Bernuz, J. M. Bofill, F. Illas, G. Albareda

*Extension of the transfer matrix methods to include long-range interactions (pòster)*

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

*Brownian dynamics simulations of enzymatic reaction-diffusion processes in crowded intracellular environments (pòster)*

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

*Macromolecular crowding effect on the cooperativity of enzymatic reactions (pòster)*

N. Vilaplana, C. Balcells, S. Madurga, J. L. Garcés, M. Cascante, F. Mas

### **Jornada catalana de supercomputació – recerca i supercomputació: compartint memòries i avançant el futur**

Barcelona (Espanya), 25 maig 2016

*Simulacions computacionals per a entendre com funcionen els enzims (comunicació oral)*

C. Rovira

### **Master Química XII**

Barcelona (Espanya), 18 maig 2016

*Simulació per Dinàmica Browniana de processos de difusió de proteïnes en medis intracel·lulars (pòster)*

P. M. Blanco, M. Via, S. Madurga, F. Mas

*Efecte de l'aglomeració macromolecular sobre la cooperativitat de l'enzim glutamat-deshidrogenasa (pòster)*

N. Vilaplana, C. Balcells, S. Madurga, J. L. Garcés, M. Cascante, F. Mas

### **NOMAD PI & SAC Meeting**

Barcelona (Espanya), 3 – 5 octubre 2016

*CO<sub>2</sub> Adsorption and Activation: Identifying Materials and Descriptors (comunicació oral)*

C. Kunkel

**Not Strictly Inorganic Chemistry - NOSIC-7**

Prullans (Espanya), 1 – 3 juny 2016

*Kurt Vonnegut's cat's cradle: a tale on science, religion and human stupidity (comunicació oral)*

P. Alemany

**Olivier Kahn Discussions**

Bordeus (França), 26 – 28 maig 2016

*Molecular Mechanisms of Spin Crossover in the {Fe(pz)[Pt(CN)<sub>4</sub>]} Metal-Organic Framework upon Water Adsorption (comunicació oral i pòster)*

J. Cirera, F. Paesani

**Partnership for advanced computing in Europe - PRACEdays16**

Praga (República Txeca), 10 – 12 maig 2016

*Computer simulation to understand how enzymes work (comunicació oral)*

C. Rovira

**6<sup>th</sup> Phase Transition and Dynamical properties of Spin Transition Materials**

Gandia (Espanya), 27 – 30 novembre 2016

*Spin crossover systems: from quantum transport to microporous materials (conferència convidada)*

E. Ruiz

**Quantum Dynamics: from Algorithms to Applications**

Greifswald (Alemanya), 5 – 8 setembre 2016

*Diabatization of the H<sub>2</sub>@SWNT system within the MCTDH approach: time scale separation of confined and free coordinates (comunicació oral)*

M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga

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

Osnabrück (Alemanya), 6 – 8 abril 2016

*Towards a first principles description of realistic models of TiO<sub>2</sub> nanoparticles (comunicació oral)*

O. Lamiel-García, K. C. Ko, S. T. Bromley, J. Y. Lee, F. Illas

**XXXII Reunió de la xarxa de Referència en Química Teòrica i Computacional de Catalunya - XrQTC**

Barcelona (Espanya), 4 – 5 juliol 2016

*On the mechanism of bistability in molecule-based magnets (comunicació oral)*

T. Francese, M. Deumal, J. Ribas-Ariño, J. J. Novoa

*Computational study of the Si/Al ratio effect in FAU-type zeolites for CO<sub>2</sub> post-combustion capture (comunicació oral)*

D. Bahamón, H. Prats, P. Gamallo, G. Alonso, X. Giménez, R. Sayós

*Density functional theory description of the electronic structure of realistic models of TiO<sub>2</sub> nanoparticles (comunicació oral)*

O. Lamiel-Garcia, K. C. Ko, S. T. Bromley, F. Illas

*Mo carbides for the conversion of CO<sub>2</sub>: the metal/C ratio as a key factor (comunicació oral)*

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

*Using open-shell molecules to design 2D covalent networks with controllable properties (comunicació oral)*

I. Alcón, F. Illas, S.T. Bromley

*Conditional Born-Oppenheimer dynamics (comunicació oral)*

E. Bernuz, J. M. Bofill, F. Illas, G. Albareda

*Towards ab-initio molecular dynamics without Born-Oppenheimer potential-energy surfaces (comunicació oral)*

G. Albareda

*Molecular sieving of H<sub>2</sub> and D<sub>2</sub> in a carbon nanotube: kinetic vs thermodynamic effects (comunicació oral)*

M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga

*Prebiotic Reactions base on Titan's Atmosphere Chemistry (comunicació oral)*

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

*Effect of mixed crowded media on the diffusion processes of proteins in intracellular media by Brownian dynamics simulations (comunicació oral)*

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

### **III Reunión de Jóvenes Investigadores en Coloides e Interfases - JICI**

Madrid (Espanya), 13 – 14 octubre 2016

*Risk assessment of manufactured nanomaterials. Where classical theories of Colloids and Interfaces meet emerging environmental challenges in the 21st Century (conferència convidada)*

C. Rey-Castro, C. David, F. Mas, J. Galceran, J. Puy

*Brownian dynamics of the macromolecular crowding effect in reaction-diffusion process in cellular media (comunicació oral)*

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



**Seminari a l'Institut de Física de la Materia Condensada (IFIMAC) 2016**

Madrid (Espanya), 2 juny 2016

*Exploring external stimuli to modulate the conductance in single-molecule wires at room conditions (confèrència convidada)*

I. Díez-Pérez

**Seminari a la Jagiellonian University**

Cracòvia (Polònia), 17 juny 2016

*Theoretical modelling of catalytic materials: as simple as possible, but not simpler (conferència convidada)*

K. M. Neyman

**Seminari a la Université de Bretagne Occidentale (UMR CNRS 6521)**

Brest (França), 1 juliol 2016

*Computational Modeling of the ligand tuning effect over the transition temperature in Spin-Crossover systems (conferència convidada)*

J. Cirera

**XXV Sitges Conference on Statistical Physics. Nonequilibrium Phenomena in Confined Systems**

Barcelona (Espanya), 6 – 10 juny 2016

*Effect of mixed crowded media on the diffusion processes of proteins in intracellular media by Brownian dynamics simulations (conferència convidada)*

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

*Extension of the transfer matrix methods to include long-range interactions in polyelectrolytes (pòster)*

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

*Macromolecular crowding effect on the cooperativity of enzymatic reactions (pòster)*

N. Vilaplana, C. Balcells, S. Madurga, J. L. Garcés, M. Cascante, F. Mas

**VI Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular - SeedMol 2016**

Alto Paraíso de Goiás (Brasil), 19 – 23 setembre 2016

*Metal-carbide synergism in heterogeneous catalysis: an overview (confèrència convidada)*

F. Viñes, P. Liu, J. A. Rodriguez, F. Illas

**XIII Simposio de Investigadores Jóvenes de la RSEQ**

Logroño (Espanya), 8 – 11 novembre 2016

*Simulaciones computacionales en procesos de elevado interés industrial (conferència convidada)*

P. Gamallo, H. Prats, G. Alonso, X. Giménez, D. Bahamón, R. Sayós

**III Simposio de Jóvenes Investigadores de la SEQT**

Barcelona (Espanya), 17 juny 2016

*Synthesis and biological activity of new resveratrol derivatives (pòster)*

L. Grau, R. Soucek, J. Rubio, M. D. Pujol

**State of the art in bistable magnetic molecules - post-ICMM Symposium**

Fukuoka (Japó), 10 setembre 2016

*First-principles theoretical studies on the mechanism of bistability in molecule-based magnets: the PDTA case (comunicació oral)*

T. Francese, M. Deumal, J. Ribas-Ariño, J. J. Novoa

**1<sup>st</sup> Symposium of the Research Unit NAGOCAT – Nanoporous Gold Catalysts - FOR2213**

Delmenhorst (Alemanya), 8 – 9 setembre 2016

*Progress in modelling of catalytic materials: engineering of bimetallic nanocrystallites (conferència convidada)*

K. M. Neyman

**Symposium on Size-Selected Clusters 2016**

Davos (Suïssa), 28 febrer – 4 març 2016

*Size dependent greenness: bottom-up versus top-down approaches to understanding titania clusters (comunicació oral)*

S. T. Bromley

**52<sup>nd</sup> Symposium on Theoretical Chemistry - STC 2016**

Bochum (Alemanya), 26 – 29 setembre 2016

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

S. Vela, M. Deumal, J. J. Novoa, J. Ribas-Ariño

**Telluride Science Research Center 2016 Workshop**

Telluride (EUA), 26 juny – 2 juliol 2016

*Spin dependent transport in single-molecule wires at room temperature (conferència convidada)*

I. Díez-Pérez, A. C. Aragonès, M. Ferrer, N. Gimeno, M. Teixidor, E. Giralt, V. Mujica

**17<sup>th</sup> Tetrahedron Symposium - Challenges in Biological, Bioorganic & Medicinal Chemistry**

Sitges (Espanya), 28 juny – 1 juliol 2016

*Synthesis of 2,6-bis(benzyliden)piperidin-4-one with potential antitumor activity (pòster)*

L. Navarro, J. Rubio, M. D. Pujol

*Design and synthesis of arylamides as potential G6PDH inhibitors (pòster)*

L. Acedo, J. Rubio, M. D. Pujol

**The Osaka City University International Conference on Molecular Spins and Quantum Technology - OCUIC-2016**

Osaka (Japó), 31 agost – 4 setembre 2016

*The mechanism of bistability in three dithiazolyl molecule-based magnetic crystals (confèrència convidada)*

J. J. Novoa, J. Ribas-Ariño, T. Francese, S. Vela, M. Deumal.

*On the mechanism of bistability in prototype PDTA molecule-based magnets (comunicació oral)*

T. Francese, M. Deumal, J. Ribas-Ariño, J. J. Novoa

**Theoretical Challenges: Simulating Materials out of Equilibrium**

Hamburg (Alemanya), 1 – 3 juny 2016

*Towards ab-initio molecular dynamics without Born-Oppenheimer potential-energy surfaces (conferència convidada)*

G. Albareda, A. Abedi, I. Tavernelli, A. Rubio

**Theoretical Modelling of Nanoparticulate Materials: Theory Catching up with Experiment**

Barcelona (Espanya), 30 setembre 2016

*Graphene interaction with Ni(111) described by modern dispersive forces*

H. Muñoz-Galán, F. Viñes, J. Gebhardt, A. Görling, F. Illas

*Bcc transition metal surfaces: trends in work functions and surface energies*

L. Vega, F. Viñes

*Mo carbides for the conversion of CO<sub>2</sub>: the metal/C ratio as a key factor*

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

A. Figueroba, G. Kovács (organització de les jornades)

K. M. Neyman (chairman)

**9<sup>a</sup> Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans**

Perpinyà (França), 3 – 5 febrer 2016

*Selective capture and separation of industrial post-combustion gases using different zeolites. A theoretical approach (comunicació oral)*

G. Alonso, F. Keshavarz, H. Prats, P. Gamallo, X. Giménez, R. Sayós

*Difusió en medis intracel·lulars. Simulació per dinàmica browniana (comunicació oral)*

M. Via, P. M. Blanco, S. Madurga, F. Mas

R. Sayós (organització de les jornades)

**4<sup>th</sup> TYC Energy Materials Workshop: Shaping Nanocatalysts**

Londres (Regne Unit), 14 – 16 desembre 2016

*Modeling realistic TiO<sub>2</sub> nanoparticles for improved photocatalytic activity from density functional theory based calculations (conferència convidada)*

F. Illas

*Sophisticated computational design of bimetallic nanocrystallites (conferència convidada)*

K. M. Neyman, G. Kovács, S. M. Kozlov

K. M. Neyman (chairman)

**Workshop on Advanced Functional Materials**

Pravets (Bulgària), 14 – 16 octubre 2016

*Computational modelling of inorganic nanomaterials for catalysis and energy technologies (conferència convidada)*

K. M. Neyman



## ESTADES EN CENTRES EXTERNS

---

- Albareda, G. **Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter, Hamburg (Alemanya)**  
Investigador visitant UB convidat per A. Rubio. Març i Novembre 2016
- Albertí, M. **Univeristà di Perugia, Perugia (Itàlia)**  
Estada de recerca. Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie. Febrer-Juliol 2016
- Alemaný, P. **Departamento de Química, Universidad Católica del Norte, Antofagasta (Xile)**  
Estada de recerca. Octubre 2016
- Alemaný, P. **Department of Materials Science and Engineering, Kyoto University, Kyoto (Japó)**  
Estada de recerca. Juliol 2016
- Climent, C. **Donostia International Physics Center, Donostia (Espanya)**  
Estada de recerca predoctoral. Juliol 2016
- Climent, C. **Institut de Chimie Radicalaire, Marsella (França)**  
Estada de recerca predoctoral. Setembre-Novembre 2016
- Díez-Pérez, I. **Weizmann Institute of Science, Rehovot (Israel)**  
Investigador visitant UB convidat per Ron Naaman. Desembre 2016
- López, M. **Laboratoire d'Electrochimie Moléculaire, UMR CNRS, Université Paris 7, Paris (França)**  
Estada predoctoral amb Christophe Demaille. Octubre-Desembre 2016
- Neyman, K. M. **Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen (Alemanya)**  
Investigador visitant convidat. Juliol-Agost 2016
- Neyman, K. M. **Uppsala University, Uppsala (Suècia)**  
Professor visitant convidat. Desembre 2016
- Poater, J. **Vrije Unvirsiteit Amsterdam (Països Baixos)**  
Investigador visitant UB convidat per F. M. Bickelhaupt. Març-Juny 2016
- Reigada, R. **Max Planck Institute, Berlin (Alemanya)**  
Professor visitant convidat per A. Mikhailov, Complex Systems Group. Maig 2016



## 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 de Dinàmica de Reaccions Químiques*

Antonio Aguilar Navarro, Universitat de Barcelona

**2014SGR0025**, 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

*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)

*Grup d'Estructura Electrònica.*

Santiago Alvarez Reverter, Universitat de Barcelona

**2014SGR662**, 2014-2016

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

*Grup d'Estructura i funció en macromolècules*

Carme Rovira Virgili, Universitat de Barcelona

**2014SGR987**, 2014-2016

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

*Grup de Bioquímica Integrativa*

Marta Cascante Serratosa, Universitat de Barcelona

**2014SGR1017**, 2014-2016

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

*Grup Nanopobes*

Ismael Díez-Pérez, Pau Gorostiza i Fausto Sanz, Universitat de Barcelona & IBEC

**2014SGR1251**, 2014-2016

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

*Simulació molecular aplicada (MOLSIMAP)*

Fèlix Lluís Llorell Ferret, IQS, Universitat Ramon Llull

**2014SGR1582**, 2014-2016

*Grup de Recerca Reconegut i Finançat per la Generalitat de Catalunya*

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



*ICREA Acadèmia*

Francesc Illas, Universitat de Barcelona

2016-2020

Institut Català de Recerca Avançada (ICREA, Generalitat de Catalunya)

*ICREA Acadèmia*

Eliseo Ruiz, Universitat de Barcelona

2014-2018

Institut Català de Recerca Avançada (ICREA, Generalitat de Catalunya)

*Beca Postdoctoral Beatriu de Pinos.*

Jordi Cirera, Universitat de Barcelona

2014-2016

AGAUR (Generalitat de Catalunya)

*Beca Postdoctoral Juan de la Cierva.*

Jorge Echeverría, Universitat de Barcelona

2016-2018

Ministerio de Economía y Competitividad

*Structure and surface composition of Pt-based bimetallic nanoparticles for catalysis and beyond*

Konstantin Neyman, Universitat de Barcelona

**QCM-2016-2-0020, QCM-2016-3-0015**, 2016-2017

Red Española de Supercomputación (RES)

*Structure and surface composition of Ni-based bimetallic nanoparticles as catalysts*

Konstantin Neyman, Universitat de Barcelona

**QCM-2015-3-0012, QCM-2016-1-0006**, 2015-2016

Red Española de Supercomputación (RES)

*Diseño computacional de pares de bases de ADN artificiales que pueden ser replicados.*

Jordi Poater, Universitat de Barcelona

**CTQ2016-77558-R**, 2017-2019

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Estudio Computacional del Control Mecanoquímico de Reacciones de Interés en Química Biorgánica.*

Josep Maria Bofill Villà & Ibério de P. R. Moreira, Universitat de Barcelona

**CTQ2016-76423-P**, 2017-2019

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Plugging Biomolecules on surfaces.*

Ismael Díez-Pérez, Universitat de Barcelona

**CTQ2015-71406-ERC**, 2015-2016

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Comprension, Control y Optimizacion en Catalisis Heterogenea y Fotocatalisis en la Nanoescala. Aplicacion a la Conversion De Dioxido De Carbono y a la Produccion de Hidrogeno*

Francesc Illas Riera i Stefan T. Bromley, Universitat de Barcelona

**CTQ2015-64618-R**, 2016-2018

Ministerio de Economia y Competitividad (MINECO)

*Estructura electrónica y propiedades en moléculas y sólidos.*

Eliseo Ruiz Sabín, Universitat de Barcelona

**CTQ2015-64579-C3-1-P**, 2016-2018

Ministerio de Economía y Competitividad

*Estructura electrónica y propiedades de moléculas y sólidos.*

Pere Alemany Cahner i Ismael Díez-Pérez, Universitat de Barcelona

**CTQ2015-64579-C3-3-P**, 2016-2018

Ministerio de Economia y Competitividad (MINECO)

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

Carme Rovira Virgili, Universitat de Barcelona

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

Ministerio de Economia y Competitividad (MINECO)

*Captura y separación de gases y contaminantes en procesos Industriales sostenibles*

Ramón Sayós Ortega i Pablo Gamallo Belmonte, Universitat de Barcelona

**CTQ2014-53987-R**, 2015-2017

Proyectos I+D+I del programa estatal de investigación, desarrollo e innovación orientada a los retos de la Sociedad

Ministerio de Economia y Competitividad (MINECO)

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

Carme Rovira Virgili, Universitat de Barcelona

**CTQ2014-55174-P**, 2015-2017

Ministerio de Economia y Competitividad (MINECO)

*FOTOFUEL – New Challenges in the Production of Solar Fuels*

Francesc Illas Riera, Universitat de Barcelona

**ENE2014-52280 -REDT**, 2013-2016

Ministerio de Economia y Competitividad (MINECO)

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

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

**MAT2014-54025-P**, 2015-2017

Ministerio de Economia y Competitividad (MINECO)

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

Antonio Aguilar Navarro i Fermín Huarte Larrañaga, Universitat de Barcelona

**CTQ2013-41307-P, 2014-2016, prorrogat 2017**

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Materia blanda forzada, activa y viva.*

Jaume Casademunt Viader i Francesc Sagués Mestre, Universitat de Barcelona

**FIS2013-41144P, 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**

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

*COMPHOTOCAT: - Computational design of TiO<sub>2</sub> 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*

Michael Reichling, Universität Osnabrück

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

*Materials Networking*

Konstantin Neyman, Universitat de Barcelona

**European Commission, Ref. N° 692146, 2016-2019**

European H2020 Cooperation Program - Research theme: 'Twinning' (H2020)

*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**

H2020, Innovative Training Networks

*Theoretical Chemistry and Computational Modelling*

Manuel Yanez, Universidad Autonoma de Madrid

**TCCM-EJD**, 2014-2018

H2020 – ITN, Research and Innovation Framework Programme

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

Marta Cascante Serratosa

**8P1ERI - H2020. PILLAR 1-EXCELLENT SCIENCE. ERI. European Research Infrastructures**, 2015-2018.

Unió Europea.

*Theoretical Chemistry and Computational Modelling (TCCM)*

Juan Jose Novoa Vide

**8P1MCA - H2020 PILLAR 1-EXCELLENT SCIENCE. MCA. Marie Skłodowska-Curie Actions**, 2015-2018.

Unió Europea.

*Deciphering the Metabolism of Haematological Cancers (HaemMetabolome)*

Marta Cascante Serratosa

**8P1MCA - H2020. PILLAR 1-EXCELLENT SCIENCE. MCA. Marie Skłodowska-Curie Actions**, 2015-2018

Unió Europea.

*Enhancing the scientific capacity of the Faculty of Chemistry and Pharmacy at Sofia University as leading regional research and innovation centre in the area of advanced functional materials (Materials Networking)*

Konstantin Neyman

**8SEWP - H2020. SEWP. Spreading Excellence and Widening Participation**, 2016-2019

Unió Europea.

*QUIFIEXP - Química Física Experimental*

Jordi Iñes Mullol

**GINDO-UB/112**, 2016-2019

PPID - Projectes d'Innovació Docent (UB)

NOMAD – Novel Materials Discovery

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

**NoMaD - 676580**, 2015-2018

H2020-EINFRA-5-2015, Centers of Excellence for Computing Applications

*Synthesis, characterization, and optical properties of  $LN_{2-x}RE_xWO_6$  ( $LN=Y^{3+}$ ;  $RE= Dy^{3+}, Er^{3+}, Eu^{3+}, Sm^{3+}$  and  $Yb^{3+}$ ) downconversion luminescent materials and their application in dye sensitized solar cells.*

Jaime Llanos, Universidad Católica del Norte, Antofagasta (Xile)

**Fondecyt Regular nº 1130248**, 2013-2016

Comisión Nacional de Investigación Científica y Tecnológica (CONICYT, Xile)

*Reducible oxide chemistry, structure and functions*

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

**CM1104**, 2012-2016

European Framework for Cooperation in Science and Technology (COST)

*Single-Molecule studies of photo-conductance on photosynthetic molecular systems by SPM break-junction measurements.*

Ismael Díez-Pérez, Pau Gorostiza, Universitat de Barcelona & IBEC

**FP7-277182**, 2012-2016

FP7-EU

*Developing single-molecule switches for applications in nanoscale organic devices (Single-Molec-Switch).*

Ismael Díez-Pérez, Nadim Darwish, Universitat de Barcelona

**PIIF-GA-2012-328893**, 2013-2016

FP7-EU

*Molecularly Assembled Electrodes.*

Jorge Pavez, Ismael Díez-Pérez (as International partner), Universitat de Santiago de Chile, Universitat de Barcelona

**Fondecyt**, 2013-2017

FONDECYT



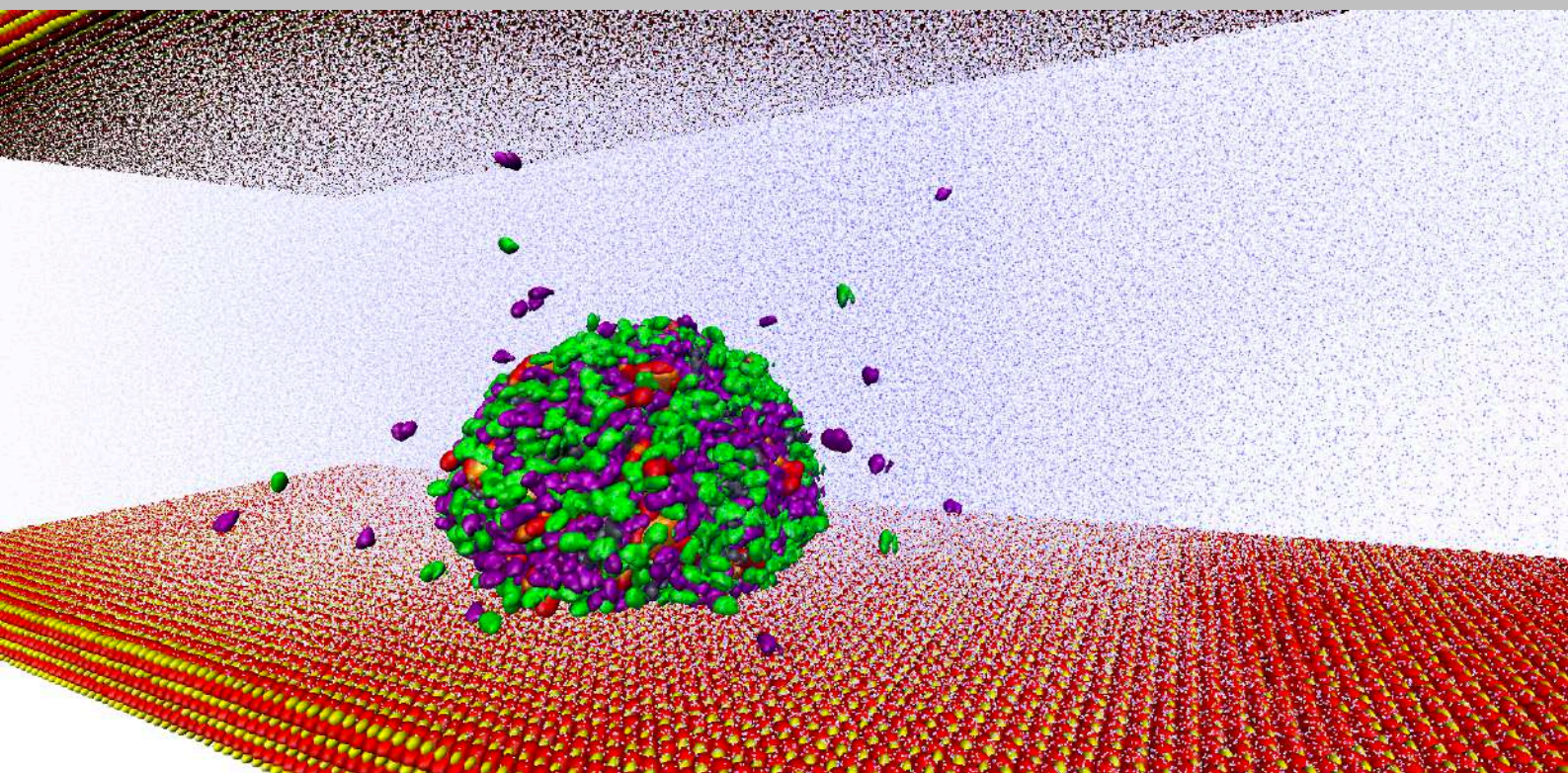


Institut de Química Teòrica  
i Computacional  
UNIVERSITAT DE BARCELONA



UNIVERSITAT DE  
BARCELONA

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



Memòria d'activitats 2016