

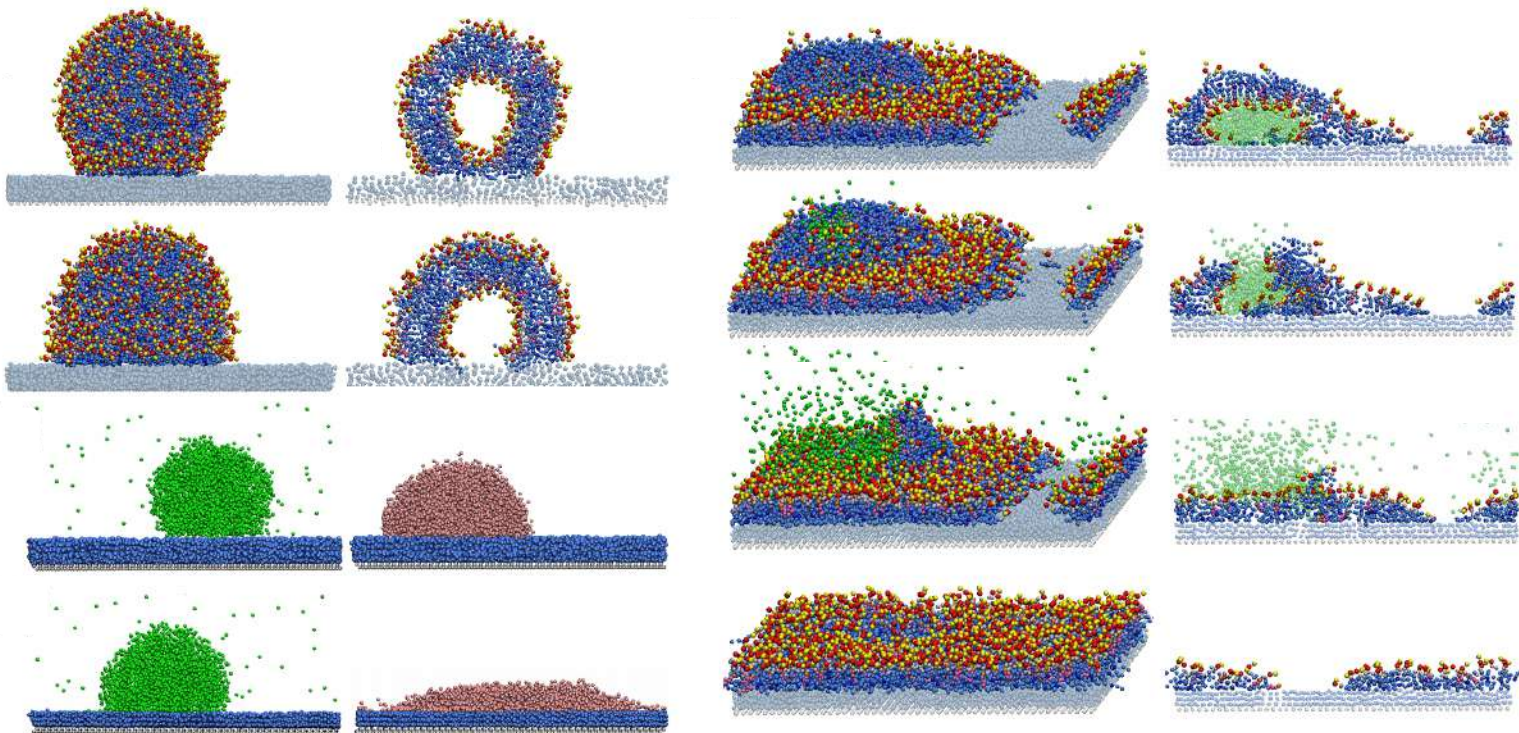


Institut de Química Teòrica  
i Computacional  
UNIVERSITAT DE BARCELONA



UNIVERSITAT DE  
BARCELONA

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



Memòria d'activitats 2017



Aquesta memòria està dedicada al Professor Jaime de Andrés Llopis (1946-2017),  
qui ens va deixar sobtadament el 13 de Setembre de 2017.

No oblidarem mai el seu positivisme i erudició global.





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. Des de aquesta data llunyana he tingut l'honor de ser-ne el Director, tasca que he intentat dur a terme malgrat les moltes dificultats degudes a l'impacte de la crisi econòmica que ens ha colpit tots aquests anys. Després de dos mandats i algun que altre llarg període en funcions, tocarà procedir al preceptiu i necessari relleu. Vull aprofitar aquesta darrera oportunitat d'encapçalat la memòria anual de l'IQTCUB per agrair explícitament als Drs. Ramón Sayós i Carme Rovira el seu suport constant com a membres de l'equip de direcció actual, i als Drs. Pere Alemany i Josep Maria Bofill per haver participat al primer equip de direcció de l'IQTCUB, als caps de grup de l'IQTCUB pel creure en aquest projecte, què poc a poc s'ha anat consolidant, i com no, agrair el continuat suport institucional dels diferents equips rectorals de la Universitat de Barcelona. No gens menys important ha estat el suport dels nostres tècnics informàtics Teresa Arenal i Jordi Inglès que amb dedicació gairebé de 24 hores al dia per 7 dies a la setmana, i en condicions de treball, que per ser políticament correctes, podem definir com poc òptimes, han mantingut els equips de càlcul funcionant de manera eficient, atents als talls de subministrament elèctric, els quals malauradament patim massa sovint, i a les pujades de temperatura que fan perillar l'estabilitat de tota la instal·lació informàtica.

Acabaré recordant que 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, cosa que no implica un laboratori típic sinó un "laboratori virtual" de càlcul que sovint només és el punt d'entrada a un centre de supercomputació amb centenars o milers de processadors. La recerca a l'IQTCUB està orientada a dissenyar nous fàrmacs i nous materials amb propietats fetes a mida, proposar nous processos químics per obtenir productes amb selectivitat i eficiència més grans, millorar processos existents per fer-los més eficients i sostenibles, o suggerir 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. Un cop més, la memòria de recerca anual mostra la vitalitat de l'IQTCUB al llarg de més de 10 anys, 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, fita que serà sens dubte assolida pel proper equip de direcció, el qual comptarà amb tot el meu suport i entusiasme.

A handwritten signature in blue ink, consisting of several overlapping loops and lines, characteristic of the name 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.....	23
II.1 Activitats de tipus general (cursos, beques i divulgació)	23
II.2 Seminaris i conferències de l'IQTCUB	34
II.3 Investigadors convidats per l'IQTCUB	36
III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB.....	37
III.1 Resultats més rellevants	37
III.2 Llista de publicacions	57
Articles publicats	57
Capítols de llibres i proceedings	73
III.3 Altres activitats	74
Tesis doctorals	74
Màsters	75
Participació a congressos	77
Estades en centres externs	94
Participació en projectes d'investigació	95



## 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 90 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
Alemaný 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	Iberio	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**

Cirera Fernández	Jordi	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Figueras Valls	Marc	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Jover Modrego	Jesús	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Martínez-Alanis	Paulina	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Piqué Caufapé	Oriol	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*

Echeverría López	Jorge	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Morales García	Ángel	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Wang	Binju	Química Inorgànica i Orgànica	Química Orgànica

*Marie-Curie*

Albareda Piquer	Guillem	IQTCUB	
-----------------	---------	--------	--

*Ramón y Cajal*

Calle Vallejo	Federico	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
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
Güell Riera	Oriol	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*

Hjorth Larsen	Ask	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Lamiel Garcia	J. Oriol	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Vilà Casanova	Arnau	Ciència de Materials i Química Física	Química Física

**Investigadors Predoctorals***Beca FI*

Balcells Nadal	Cristina	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Blanco Andrés	Pablo Miguel	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Nin Hill	Alba	Química Inorgànica i Orgànica	Química Orgànica
Prats García	Hèctor	Ciència de Materials i Química Física	Química Física

*Beca FPI*

Bernuz Fitó	Efrem	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Climent Biescas	Clàudia	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Coines López-Nieto	Joan	Química Inorgànica i Orgànica	Química Orgànica
Martín Rodríguez	Alejandro	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Piñero Vargas	Juan José	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
Mondelo Martell	Manel	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Vilaplana Saiz	Marta	Ciència de Materials i Química Física	Química Física

*Beca ITN UE*

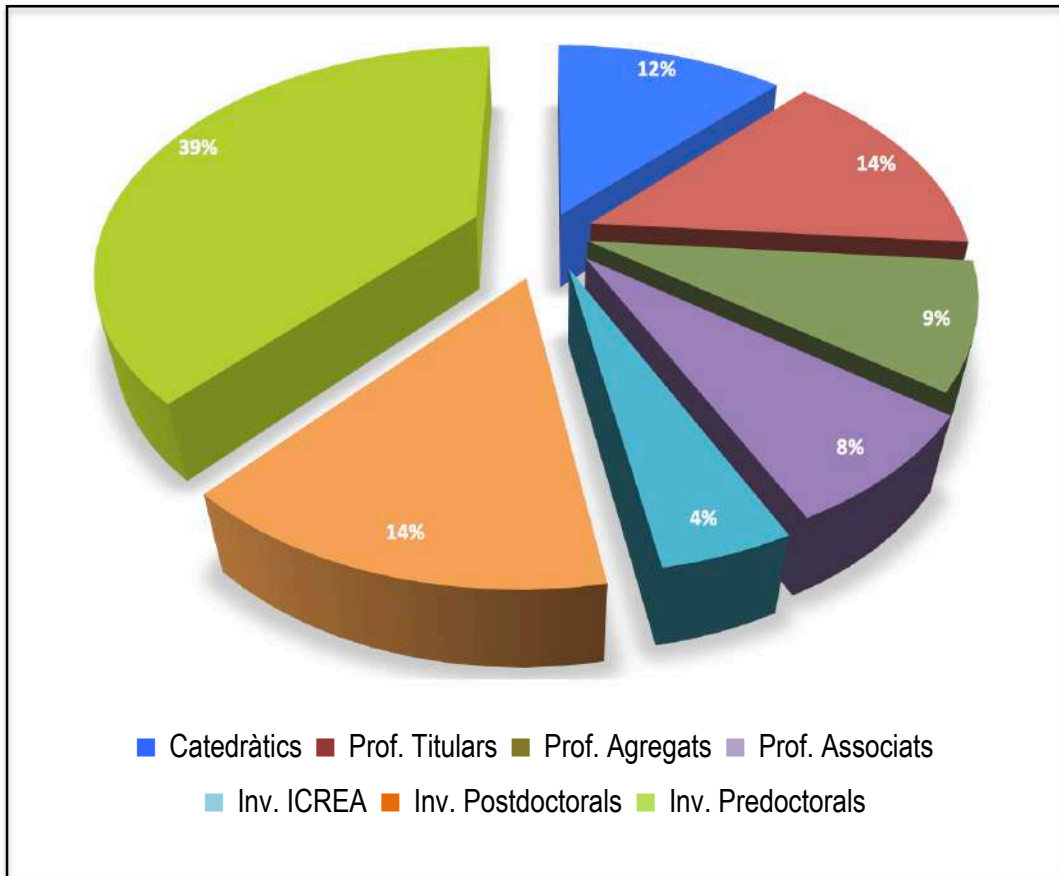
Cuko	Andi	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Francese	Tommaso	Ciència de Materials i Química Física	Química Física

*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
Macià Escatllar	Antoni	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Roncero Barrero	Cristina	Ciència de Materials i Química Física	Química Física

*Altres*

De Moya	Natalia	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Figueroba Sánchez	Alberto	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Gómez Mudarra	Francisco	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Kamalinahad	Saedeh	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Keshavarz	Sarah	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Lidmar von Ranke	Natalia	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
López Berbel	Martí	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Lozano Reis	Pablo	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Muñoz Galán	Helena	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Patel Vijaykumar	Mitali	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Privat Contreras	Cristian	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Raich Armendáriz	Lluís	Química Inorgànica i Orgànica	Química Orgànica
Svobodova	Adela	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Vega Domínguez	Lorena	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 nou 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 i dos de 9,000 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 1,80 GHz (64bits)

RAM: 8 GB

HD: 1 disc de 146 GB + cabina discos amb 2,5 TB

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 3,06 GHz Sun Fire V60X**

CPU: Xeon Dual a 3,06 GHz (32 bits)

RAM: 3 GB

HD: 2 discos de 36 GB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna) + 2 targetes lom 100 (administració interna entre nodes)

**92 nodes 32 bits a 2,80 GHz Sun Fire V60X**

CPU: Xeon Dual a 2,80 GHz (32 bits)

RAM: 6 nodes a 4 GB, 86 nodes a 3 GB

HD: 2 discos de 36 GB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna) + 2 targetes lom 100 (administració interna entre nodes)

**11 nodes 64 bits a 1,80 GHz Sun Fire V20Z**

CPU: Opteron Dual a 1,80 GHz (64 bits)

RAM: 10 nodes a 8 GB, 2 nodes a 16 GB

HD: 10 nodes de 2 discos de 73 GB, 2 nodes de 2 discos de 73 GB i 300 GB, respectivament

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna) + 2 targetes lom 100 (administració interna entre nodes)

**1 node 64 bits a 2,20 GHz Sun Fire V20Z**

CPU: Opteron Dual a 2,20 GHz (64 bits)

RAM: 16 GB

HD: 2 discos de 146 GB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna) + 2 targetes lom 100 (administració interna entre nodes)

**iqtc01** (valor invertit 250.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster HP
<i>Sistema Operatiu</i>	Debian Stable
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul
<i>Estructura</i>	80 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Tots els processadors són de 64 bits

*Especificacions:*

**80 nodes AMD HP ProLiant DL145 G2**

CPU: 2 AMD Opteron 275 Dualcore a 2,2 GHz

RAM: 8 GB

HD: 2 discos de 80 GB

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 2,66 GHz

RAM: 16 GB

HD: 2 discos de 250 GB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa d'administració ILO

**5 nodes INTEL HP ProLiant DL160 G5**

CPU: 2 Xeon QuadCore 2,66 GHz

RAM: 16 GB

HD: 4 discos de 250 GB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa d'administració ILO

**1 node INTEL HP ProLiant DL160 G5**

CPU: 2 Xeon QuadCore 2,66 GHz

RAM: 16 GB

HD: 2 discos de 500 GB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa d'administració ILO

**3 INTEL HP ProLiant DL160 G5 nodes**

CPU: 2 Xeon QuadCore 2,66 GHz

RAM: 32 GB

HD: 2 discos de 250 GB

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 2,33 GHz

RAM:16-32 GB

HD: 2 discos de 80 GB

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 2,66 GHz

RAM: 48 GB

HD: 1 disc de 1 TB

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 2,66 GHz

RAM: 48 GB

HD: 4 discos de 500 GB

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 2,66 GHz

RAM: 48 GB

HD: 1 disc de 500 GB

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 2,3 GHz

RAM: 256 GB

HD: 2 discos de 1 TB

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 x 2,2 GHz Xeon OctoCore

RAM: 512 GB

HD: 2 discos de 300 GB

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 x 2,3 GHz Xeon OctoCore

RAM: 512 GB

HD: 3 discos de 1 TB

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa: 2 targetes 10GB (xarxa càlcul)

Xarxa d'administració IPMI

**iqtc07** (valor invertit 40.000 €)

*Tipus de màquina* Clúster Supermicro

*Sistema Operatiu* SLES12

*Serveis* Clúster de càlcul

*Estructura* 2 nodes en clúster

*Comentaris* Tots els processadors són de 64 bits

*Especificacions:*

**2 nodes Supermicro 2048U RT4**

CPU: 4 x 2,6 GHz Intel Broadwell 10Core

RAM: 512 GB or 1 TB

HD: 1 x 1 TB

Xarxa: 4 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa: 2 targetes 10GB (xarxa càlcul)

Xarxa d'administració ILO

**iqtc08** (valor invertit 155.000 €)

*Tipus de màquina* Clúster HP

*Sistema Operatiu* Centos 7.2

*Serveis* Clúster de càlcul

*Estructura* 21 nodes en clúster

*Comentaris* Tots els processadors són de 64 bits

*Especificacions:*

**21 HP Proliant DL360 Gen9**

CPU: 2 x 2,6 GHz Intel Xeon E5-2690 v4 14-core

RAM: 768 GB

HD: 1 x 1 TB

Xarxa: 4 targetes 100/1000 (xarxa interna)

Xarxa: 2 targetes 10GB (xarxa càlcul)

Xarxa d'administració ILO

**Clúster GPU** (valor invertit 57.000 €)

<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 són de 64 bits

*Especificacions:***Node**

CPU: 1 Intel Core i7 950 3,06 GHz  
RAM: 16 GB  
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 2,66 GHz  
RAM: 48 GB  
HD: 1 disc dur de 500 GB  
Xarxa: 4 targetes 100/1000 (xarxa interna)  
Xarxa d'administració IPMI  
GPU: 8 NVIDIA GTX580

**Node**

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

**Node INTEL ASUS ESC4000 G2**

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

**Node INTEL ASUS ESC4000 G2**

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

**Node AZServer 4G3S**

CPU: 2 x 2,4 GHz Xeon E5-2620v3  
RAM: 32 GB  
HD: 1 disc dur de 1 TB  
Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)  
Xarxa d'administració IPMI  
GPU: 4 NVIDIA GTX 980

**Node SIE LADON BROADWELL**

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

**Node SIE LADON BROADWELL 2**

CPU: 2 x 2,4 GHz Xeon E5-2640v4  
RAM: 128 GB  
HD: 1 disc dur de 1 TB  
Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa interna)  
Xarxa d'administració IPMI  
GPU: 2 NVIDIA TESLA P100

## 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 x 2,50 GHz Xeon QuadCore E5420  
RAM: 8 GB  
HD: 1 disc 80 GB (Sistema operatiu) + 4 discs 1 TB (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 x 2,27 GHz Xeon QuadCore E5520

RAM: 56 GB

HD: 12 discs 2 TB (raid 5)

Xarxa: 4 targetes 100/1000 xarxa interna

Xarxa d'administració ILO

**Node INTEL HP ProLiant DL380e Gen8**

CPU: 2 x 2,20 GHz Xeon QuadCore E5-2407

RAM: 48 GB

HD: 12 discs 2 TB (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 2,33 GHz

RAM: 8 GB

HD: 1 disc de 160 GB (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 x 2,50 GHz Xeon QuadCore E5420  
RAM: 8 GB  
HD: 1 disc 80 GB (Sistema operatiu) + 4 discs 1 TB (raid 5)  
Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna  
Xarxa d'administració ILO

**2 Nodes HP ProLiant DL120 G5**

CPU: 1 Xeon Dual Core 2,33 GHz  
RAM: 8 GB  
HD: 2 discos de 160 GB (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 2,2 GHz  
RAM: 4 GB  
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 4 TB 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 publica 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 modulable HP (8 mòduls per xarxa interna clúster iqtc01,iqtc02,iqtc03).
10. 2 Switchs modulables HP 10 GB (xarxa interna clúster iqtc06 i servidors de fitxers).
11. 2 Switchs Netgear XS728T 10 GB (xarxa interna i dades clúster iqtc08).
12. 1 Switch HPE 1810-24 (xarxa interna clúster iqtc08)

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

## RESUM DEL POTENCIAL DE CÀLCUL \_\_\_\_\_

Cores.....3,994 c

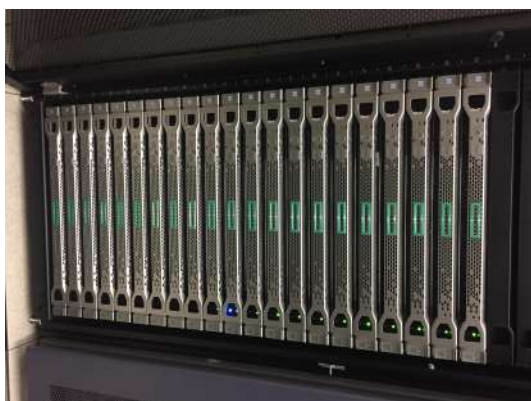
Memòria..... 37,816 GB RAM

Discs de Càlcul..... 199 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 **2.028.000 €\***

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



Clúster de CPUs iqt08 (esquerra) i clúster de GPUs (dreta) 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 2017.

- 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 Biel Martínez Díaz, Pablo Lozano Reis i Cristian Privat Contreras, per iniciar el màster corresponent sota la direcció dels Drs. Fermín Huarte, Pablo Gamallo i Jaime Rubio, respectivament.

*Despesa associada: 6.246 €*



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

- b. **8<sup>a</sup> Jornada de l'IQTCUB.** El 2 de Juny de 2017 tingué lloc la vuitena 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 de la Prof. Dr. Carmen Herrmann de la Universitat d'Hamburg amb la conferència titulada *Pathways in molecular conductance and spin coupling*, el Dr. Carles Curutchet (*Multiscale modelin of light harvesting and energy transfer in photosynthesis*), Manel Mondelo (*The importance of the tunnel effect on the diffusion of H<sub>2</sub> along a SWCNT*), Dr. Jordi Poater (*Chemically-controlled DNA nanoswitch*), Àngel Morales-García (*Effect of the pressure on the synthesis of ADOR zeolites*) i el Dr. Ismael Díez (*Tailoring the electrical behavior of a single molecule contact*) de la Universitat de Barcelona i l'IQTCUB. A més a més es presentaren 15 contribucions en format pòster. Les despeses totals de la Jornada es corresponen al cost del transport i l'estada de la Prof. Dr. C. Herrmann Walter i del servei de càtering ofert a tots assistents.

Despesa pressupostada: 1.730 €

Anunci de la 8<sup>a</sup> Jornada de l'IQTCUB.

c. **7è 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 setena 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 2017 han estat:

1. *Introducció al Linux*, Oriol Lamiel i Antoni Macià (UB, IQTCUB).
2. *Visualització de Biomolècules*, Drs. Carme Rovira, Alba Nin, Joan Coines i Binju Wang (UB, IQTCUB).
3. *Programació estructurada*, Profs. Albert Solé i J. Carlos Paniagua (UB, IQTCUB).
4. *Autòmata cel·lular*, Prof. Pere Alemany i Efreem Bernuz (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).

En aquesta edició, celebrada del 26 al 30 de Juny de 2017, han participat 15 alumnes.

*Despesa pressupostada: 250 €*

**iqtc** Institut de Química Teòrica i Computacional  
UNIVERSITAT DE BARCELONA

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

● 26/06 al 30/06 matins de 9:00 a 13:30  
● 25 places  
● aprofundiment en Linux, programació, eines de la Química Computacional

info & inscripció: [http://www.iqtc.ub.edu/Curs\\_IQC](http://www.iqtc.ub.edu/Curs_IQC)

Anunci del 7<sup>è</sup> *Curs d'Introducció a la Química Computacional* celebrat enguany.

- d. **6<sup>è</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 sisena edició del *Curs Avançat de Química Computacional* organitzat pels 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 3 al 7 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: C. Vilar, N. Górriz, P. Lozano, E. Braña, R. Santiago, M. Condeminas, A. González, M. Peralta, R. Morales, P. Llinares, L. Castilla, R. Herrera, M. Torres, O. Gómez i M. Cortes. 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. *Estats excitats*, Prof. Mercè Deumal (UB, IQTCUB).
5. *Introducció SGE*, Jordi Inglès i Teresa Arenal (*tècnics informàtics IQTCUB*).
6. *Estat sòlid*, Profs. Iberio Ribeiro (UB, IQTCUB).
7. *Fortran 90*, Prof. Miquel Llunell (UB, IQTCUB).



Institut de Química Teòrica  
i Computacional de la UB

iqtc  
UB

## VI CURS AVANÇAT DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

- 3 al 7 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 6<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 aquest 2017 han continuat els 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 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 2017:

1. *Influence of the sulfur bridge in the photophysics of covalent naphthalene dimers.*  
Claudia Climent, 20 gener 2017.
2. *BASH: Not only terminal commands, but also a programming language.*  
Gerard Alonso, 20 gener 2017.
3. *How to give successful talks.*  
Prof. Stefan T. Bromley, 3 març 2017.
4. *Effect of Si/Al ratio on CO<sub>2</sub> capture by adsorption with faujasites and application in engineering processes.*  
Dr. Daniel Bahamon, 28 abril 2017.
5. *Modelling the reaction intermediate of glycoside hydrolases.*  
Joan Coines, 28 abril 2017.
6. *Introducció a l'aproximació GTD (no és de Química Quàntica, és d'organització personal).*  
Prof. Albert Solé, 9 juny 2017.
7. *Enzymes with biotechnological applications.*  
Lluís Raich, 21 juliol 2017.
8. *Experimental and theoretical points of view of Li<sup>+</sup> i-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>Br gas-phase reaction.*  
Dr. Estefanía López, 21 juliol 2017.
9. *Dynamics of reactions inside superfluid Helium nanodroplets.*  
Miquel Blancafort, 6 octubre 2017.
10. *Astronomical Dust: Origin, importance and current knowledge.*  
Antoni Macià, 6 octubre 2017.
11. *Unraveling brain diseases using QM/MM methods: Catalytic study of b-galactocerebrosidase.*  
Alba Nin, 17 novembre 2017.
12. *Discovery of novel silicon carbonate (SiCO) at high pressure.*  
Dr. Angel Morales, 17 novembre 2017.

f. **Activitats de divulgació científica.** El Prof. Xavier Giménez Font ha realitzat la següent sèrie de xerrades de divulgació científica i docent durant aquest any 2017:

1. “UB s’Apropa 17”.  
Europa International School Sant Cugat del Vallès, 16 Gener 2017.  
Institut Manuel Blancafort, La Garriga, 17 Gener 2017.  
Escola Pia de Granollers, Granollers, 27 Gener 2017.  
Escola Pia de Caldes, Caldes de Montbui, 30 Gener 2017.  
Escola Municipal del Treball, Granollers, 1 Febrer 2017.  
Institut La Vall del Tenes, Sta. Eulàlia de Ronsana, 3 Febrer 2017.  
Institut Maria de Bell-Lloc, Bigues i Riells, 6 Febrer 2017.  
Institut Alba del Vallès, Sant Fost de Campsentelles, 8 Febrer 2017.  
Alba del Vallès, Sant Fost de Campsentelles, 9 Febrer 2017.
2. “Active Learning Education in Science”, Round Table in “**Jornada d’Investigadors Predoctorals Interdisciplinària**”. Universitat de Barcelona, Barcelona, 9 Febrer 2017.
3. “UB s’Apropa 17”.  
Institut La Roca del Vallès, La Roca del Vallès, 10 Febrer 2017.  
Institut Vilanova del Vallès, Vilanova del Vallès, 10 Febrer 2017.  
Institut Vilanova del Vallès, Vilanova del Vallès, 10 Febrer 2017.  
Institut Moianès, Moià, 16 Febrer 2017.  
Institut Mollet del Vallès, Mollet del Vallès, 17 Febrer 2017.  
Institut El Sui, Cardedeu, 21 Febrer 2017.  
Jesuïtes Sant Gervasi – Escola Infant Jesús, Barcelona, 22 Febrer 2017.  
Institut El Sui, Cardedeu, 23 Febrer 2017.  
Institut Milà i Fontanals, Vilafranca del Penedès, 1 Març 2017.  
Institut Camí de Mar, Calafell, 2 Març 2017.
4. “L’Aire que respirem”. **Toc–Toc UB Science Dissemination Program**, Institut Manuel Blancafort, La Garriga, 30 Març 2017.
5. “UB s’Apropa 17”.  
Institut Manolo Hugué, Caldes de Montbui, 7 Abril 2017.
6. “L’Aire que Respirem”. **Toc–Toc UB Science Dissemination Program**, Escola Municipal del Treball, Granollers, 19 Abril 2017.

7. “*Hagamos posible el buen rendimiento académico*”, 4-hour course at Universidad de Extremadura, Cáceres, 4 Maig 2017.
8. “*Les Microones i les Ones de Ràdio: què són i com ens afecten?*”. **Toc-Toc UB Science Dissemination Program**, Centre Cultural Sant Josep — Jornades “Pessics de Ciència”, Hospitalet de Llobregat, 17 Maig 2017.
9. “*The role of Universities in the Energy Transition: multidisciplinary education and research*”. **5th Uni-SET Meeting**. KU Leuven, Leuven, Belgium, 2 Juny 2017.
10. “*Ensenyar a aprendre: millorem l’aprenentatge de les ciències i la tecnologia*”, 8-hour course at Universitat de Lleida, Lleida, 5 Juny 2017.
11. “*Profesores de Ciencias, hagamos posible el buen rendimiento académico sin clases magistrales*”, 8-hour course at Universidad de Sevilla, Sevilla, 19–20 Juny 2017.
12. “*El mètode SABER de classe invertida síncrona en un entorn STEM*”. One-day meeting “**L’enfocament d’aula inversa a la Universitat**”, Universitat de Girona, 21 Juny 2017.
13. “*Let’s make high academic performance possible*”. Workshop **Learnin’s Creatin’**. Instituto Politécnico de Viseu, Viseu, Portugal, 13–14 Setembre 2017.
14. “*Practical strategies to improve students’ performance, with emphasis on STEM: the SABER synchronous flipped classroom*”. Conference at “**1st international conference in experiences in active learning in higher education**”, Facultat d’Economia i Empresa, Universitat de Barcelona, 27 Octubre 2017.
15. “*Llibres de Divulgació Científica*”, Màster de Comunicació Científica, Univ. Barcelona, 13 Novembre 2017.
16. “*L’Aire que Respiram*”, **La Setmana de la Ciència**, Institut Joan Brudieu, La Seu d’Urgell, 15 Novembre 2017.
17. “*La màgia de l’aigua*”, **La Setmana de la Ciència**, Sala Noble de Can Rius, Caldes de Montbui, 17 Novembre 2017.
18. “*UB s’Apropa 18*”.  
La Salle Manresa, Social Science Students, Manresa, 24 Novembre 2017.  
La Salle Manresa, Science Students, Manresa, 24 Novembre 2017.

19. “*L’Aire que Respirer*”. **Toc–Toc UB Science Dissemination Program**, Oak House School, Barcelona. 29 Novembre 2017.
20. “*L’Aire que Respirer*”. **Toc–Toc UB Science Dissemination Program**, Biblioteca Sagrada Família, Barcelona. 29 Novembre 2017.
21. “*Enseñar a aprender: de las clases magistrales a la clase invertida síncrona*”, Opening Lecture at **IV Jornadas de Docencia Universitaria** de la Universidad de Sevilla, Sevilla, 4–5 Desembre 2017.

A més a més, el Prof. Giménez ha realitzat entrevistes per als següents mitjans de comunicació:

1. “*Education in Science*” Discussion at JIPI’17, Jornada d’Investigadors Predoctorals Interdisciplinària. **UBTV**, Universitat de Barcelona, 9 Febrer 2017 (<http://www.ub.edu/ubtv/video/debate-education-in-science>).
2. “*Can Barcelona superblocks cut traffic and clean up city air?*” Interview by Sophie Davies, United States edition of **Reuters.com**, 23 Febrer 2017 (<http://www.reuters.com/article/us-spain-urban-pollution-transport-idUSKBN1621E7>).
3. “*Què és la felicitat*” Interview by Guillem Martínez, Science section of **BTV**, 20 Març 2017 (<http://beteve.cat/seccions/tecnologia/>).
4. “*Dormir a prop del mòbil: entre el risc i la falsa alarma*”. Interview by Marc Garcia, Life section of **El Món**, 25 Març 2017 (<http://elmon.cat/noticia/192028/dormir-a-prop-del-mobil-entre-el-risc-i-la-falsa-alarma>).
5. “*La polémica solución de Trump al cambio climático: lanzar productos químicos al aire*”. Interview by Rocío Pérez Benavente, Science section of **El Confidencial**, 29 Març 2017 ([http://www.elconfidencial.com/tecnologia/ciencia/2017-03-29/geoingenieria-solar-cambio-climatico-quimicos-atmosfera\\_1356072/](http://www.elconfidencial.com/tecnologia/ciencia/2017-03-29/geoingenieria-solar-cambio-climatico-quimicos-atmosfera_1356072/)).
6. “*La contaminació de l’aire que respirem al Vallès Oriental*”. Interview by Dani Agudo for Infovallès, **VOTV**. 19 Abril 2017 (<http://votv.xiptv.cat/entrevista#>).
7. “*Dudas sobre la efectividad de las medidas anticontaminación*”. Interview by Pablo Alegre, Mobility section, **Metrópoli Abierta Barcelona**, 20 Abril 2017 ([http://www.metropoliabierta.com/el-pulso-de-la-ciudad/movilidad/restringir-acceso-barcelona-problemas-soluciones-contaminacion\\_1055\\_102.html](http://www.metropoliabierta.com/el-pulso-de-la-ciudad/movilidad/restringir-acceso-barcelona-problemas-soluciones-contaminacion_1055_102.html)).

8. “*Ha pujat l’ús de mascaretes antipol·lució. Són efectives?*”. Interview by Miriam Santamaria, program **Verd Primera**, **BTV**, 10 Maig 2017 (<http://beteve.cat/clip/entrevista-a-xavier-gimenez-i-pau-girbau-sobre-les-mascaretes-antipollucio/>).
9. “*Les microones i les ones de ràdio: què són i com ens afecten*”. Conference within the series “**Pessics de Ciència**”, Centre Cultural Sant Josep, L’Hospitalet de Llobregat, 17 Maig 2017 (<https://www.youtube.com/watch?v=UKEhCROFrhk>).
10. “*El termòmetre i el mercuri*”, Interview by Marta Ballesta, Program “Les 10 notícies”, **BTV**, 16 Juny 2017 (<http://beteve.cat/programes/les-10-noticies/>).
11. “*La contaminació atmosfèrica*”. Interview by Martí Roma et al, for a **newsgame within a Degree Final Report** (TFG), Journalism Degree, Universitat Pompeu Fabra, Barcelona (<http://verdalia.cat/>).
12. “*El mètode SABER de classe invertida síncrona en un entorn STEM*”. One-day meeting “**L’enfocament d’aula inversa a la Universitat**”, Universitat de Girona, 21 Juny 2017 (<http://diobma.udg.edu/handle/10256.1/4836>).
13. “*L’Aire que Respiram*”. Talk at INS Joan Brudieu, La Seu d’Urgell, during “La Setmana de la Ciència 2017”, 15 Novembre 2017 (<https://www.youtube.com/watch?v=nxWkozNzWYk>).

## 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. **Prof. Manuel Alcamí** (Universidad Autónoma de Madrid), Madrid, Espanya.  
*Nanoestructuras de carbono modificadas por la interacción con metales: ¿Qué nos aportan los cálculos teóricos?*  
12 gener 2017.
2. **Prof. Sebastien Thibaudeau** (Institut de Chimie des Milieux et Matériaux de Poitiers, Université de Poitiers) Poitiers, França.  
*Superelectrophilic activation in superacid media: how to predict it?*  
14 febrer 2017.
3. **Dr. Monica Calatayud** (Laboratoire de Chimie Théorique, Université P. M. Curie), Paris, França.  
*Ab initio modelling of materials: role of surfaces in reactivity.*  
30 març 2017.
4. **Dr. Adriana Isvoran** (Dept. Biology-Chemistry and Advanced Environmental Research Laboratories, West University of Timisoara), Timisoara, Romania.  
*Cheminformatics of xenobiotics.*  
20 abril 2017.
5. **Prof. J. Peter Toennies** (Max Plank Institute for Dynamics and Self-Organization), Göttingen, Alemanya.  
*Enigmatic molecules of helium and molecules in enigmatic helium.*  
26 abril 2017.

6. **Dr. Rubén Pérez** (Universidad Autónoma de Madrid), Madrid, Espanya.  
*Adatoms, polarons and the catalytic activity of ceria: microscopic insights from first principles calculations.*  
25 maig 2017.
  
7. **Michael Nolan** (Tyndall National Institute), Cork, Irlanda.  
*Functional metal oxide surfaces and interfaces.*  
5 octubre 2017.
  
8. **Prof. Jong Min Lee** (Nanyang Technological University) Singapur.  
*Ionic liquids and their applications.*  
19 octubre 2017.
  
9. **Prof. Mariona Sodupe** (Universitat Autònoma de Barcelona), Barcelona, Espanya.  
*Mineral induced prebiotic chemical processes. Insights from computational approaches.*  
16 novembre 2017.
  
10. **Dr. Daniel Reta** (University of Manchester), Manchester, Regne Unit.  
*Molecular magnetic hysteresis at 60 K in dysprosocenium.*  
23 octubre 2017.



## II.3 INVESTIGADORS CONVIDATS PER L'IQTCUB

Durant el 2017, l'IQTCUB ha acollit un total de set visites temporals d'investigadors externs.

1. **Fatemeh Keshavarz** (visitant convidat).  
College of Science, Shiraz University, Shiraz, Iran.  
Setembre 2016 - maig 2017.
2. **Haruna Luz Barazorda Ccahuana** (visitant convidat).  
Universitat Catòlica de Santa Maria de Arequipa, Yanahuara, Perú.  
Agost - novembre 2017.
3. **Prof. Hristiyan Alesandrov** (visitant convidat).  
University of Sofia, Sofia, Bulgària.  
Gener - febrer, juliol - agost 2017.
4. **Prof. Jorge Pavez** (visitant convidat).  
Universitat de Santiago de Xile, Xile.  
Desembre 2017.
5. **Lorenzo Zamirri** (visitant convidat).  
Universitat de Torino, Torino, Itàlia.  
Desembre 2017.
6. **Dr. Miroslava Nedyalkova** (Materials networking European project).  
University of Sofia, Sofia, Bulgària.  
Febrer - març, juliol - agost 2017.
7. **Saedeh Kamalinahad** (visitant convidat).  
Department of Chemistry, Arak University, Arak, Iran.  
Agost 2017 - febrer 2018.

## 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

##### **An algorithm to Locate Optimal Bond Breaking Points on a Potential Energy Surface for Applications in Mechanochemistry and Catalysis**

J. M. Bofill, J. Ribas-Ariño, S. P. García, W. Quapp.

**J. Chem. Phys.**, 147 (2017) 152710.

$$\text{Optimal Bond Breaking Point conditions} \begin{cases} \mathbf{H}(\mathbf{x}_{optBBP})\mathbf{g}(\mathbf{x}_{optBBP}) = \mathbf{0} \\ \mathbf{g}(\mathbf{x}_{optBBP}) \neq \mathbf{0} \end{cases}$$

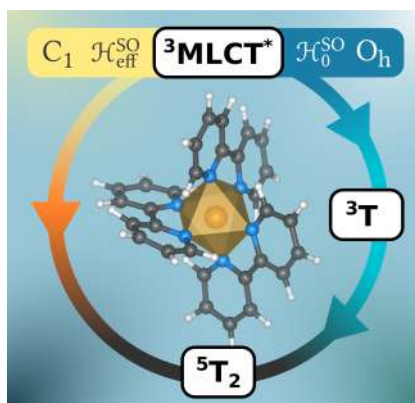
Quan en un sistema molecular s'aplica una força externa, aleshores els reactius, productes i estats de transició col·lapsen en un mateix punt del camí de reacció. Aquest punt se'l coneix amb el nom de punt de trencament de l'enllaç (BBP de l'acrònim anglès). En aquest punt la matriu Hessiana té un valor propi nul i el seu vector propi coincideix amb el gradient. Aquest gradient indica la força, tant en magnitud com amb direcció que s'ha d'aplicar de manera que la reacció transcorri sense barrera. Dintre del conjunt de punts de trencament d'enllaç hi ha un que és l'òptim, el BBP òptim, que indica quina és la mínima magnitud i la direcció òptima que ha de tenir la força externa a fi i efectes que la reacció tingui lloc. Donada la importància d'aquests punts, s'ha proposat i desenvolupat un algoritme Gauss-Newton per la seva localització en una superfície d'energia potencial.

## LÍNIA 2. CIÈNCIA DELS MATERIALS COMPUTACIONAL

### Effect of Second-Order Spin-Orbit Coupling on the Interaction between Spin States in Spin-Crossover Systems

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

Chem. Eur. J., 23 (2017) 1.



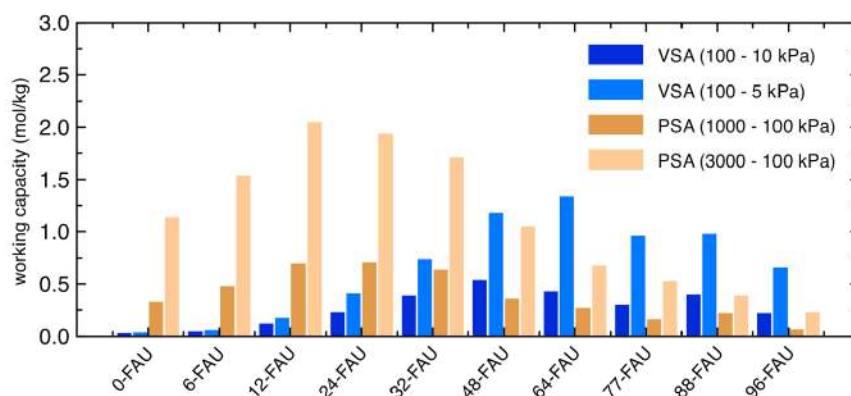
La inclusió d'efectes de segon ordre a l'acoblament espín-òrbita juntament amb distorsions geomètriques explica el mecanisme de la conversió d'espín mediada per llum.

La inclusió de l'acoblament espín-òrbita a segon ordre en dos complexos de metalls de transició permet avaluar el seu efecte en el mecanisme de desactivació des de l'estat excitat de baix espín en sistemes susceptibles de transició d'espín per efecte de la llum. La combinació de dos efectes, les distorsions geomètriques i els termes de segon ordre a l'acoblament espín-òrbita, dona lloc a interaccions significatives per estats que en l'estructura simètrica (amitjanada) del complex apareixen pràcticament desacoblats. Això obre la possibilitat a la desactivació directa des dels estats singlet i triplet de transferència de càrrega del metall al lligand cap a l'estat final d'alt espín, tal com suggereix la interpretació experimental que fins ara no havia pogut ser confirmada mitjançant càlculs teòrics.

### Optimal Faujasite structures for post combustion CO<sub>2</sub> capture and separation in different swing adsorption processes

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

*J. CO<sub>2</sub> Util.*, 19 (2017) 100.



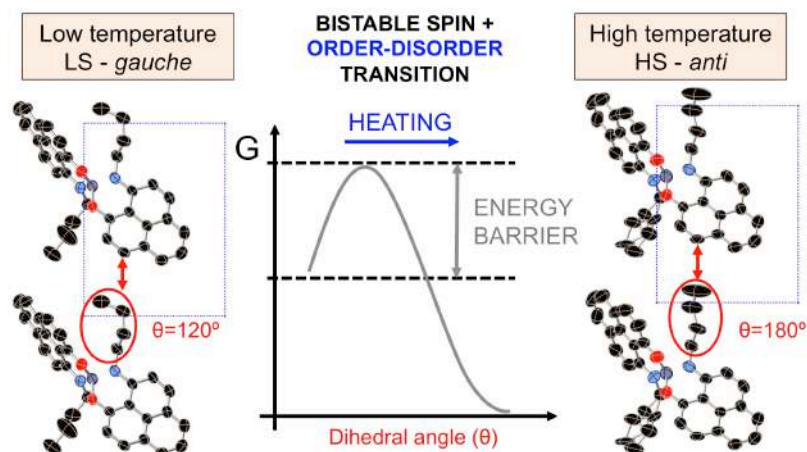
Capacitats de treball de CO<sub>2</sub> per a 10 estructures FAU estudiades, corresponent als processos PSA i VSA a diferents pressions i a 313 K.

En aquest treball s'utilitzen simulacions de Gran Canònic Monte-Carlo per avaluar les estructures òptimes de faujasites en processos de captura de CO<sub>2</sub>. S'han considerat els procediments Pressure Swing Adsorption (PSA) and Vacuum Swing Adsorption (VSA) per avaluar la puresa, la capacitat de treball i el temps de pas. Amb aquesta finalitat, s'han seleccionat deu faujasites amb diferents continguts en Al, i s'han calculat les millors condicions per a la captura màxima de CO<sub>2</sub> amb cada estructura. Les zeolites que tenen un contingut intermedi en Al són les més efectives per als processos de VSA, mentre que les baixes en Al van millor en processos PSA. Les faujasites estudiades milloren clarament les prestacions VSA-PSA de la faujasita 13X, fins ara considerada com la referència industrial en absència d'aigua. D'altra banda, també s'han estudiat processos combinats VPSA, en termes de capacitat de treball i del treball adiabàtic requerit per a la compressió/expansió, mostrant que els sistemes VPSA són més eficients que els PSA/VSA per a estructures amb contingut intermedi d'Al. Finalment, es va derivar una metodologia millorada on es combinen isoterms de mesclades i càlculs de costos energètics, i es va proposar una forma més precisa d'estimar les capacitats de treball i els temps de pas.

## Origin of bistability in the butyl-substituted spirobiphenalenyl-based neutral radical material

M. Fumanal, J. J. Novoa, J. Ribas-Ariño.

Chem. Eur. J., 23 (2017) 7772.

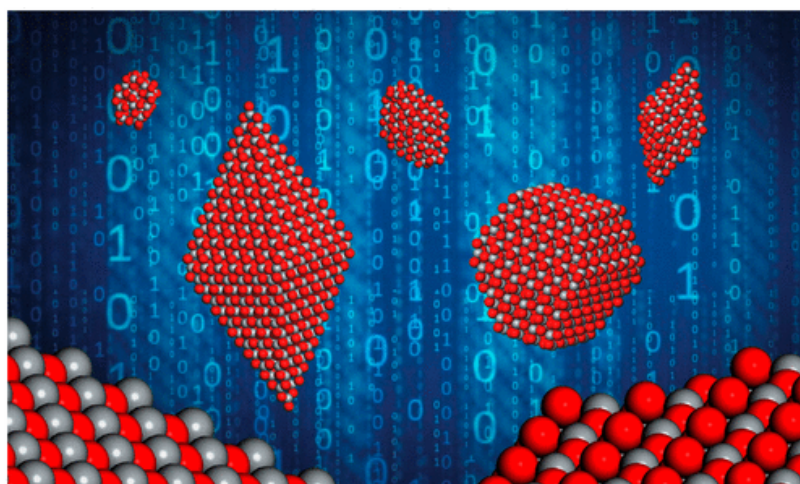


Un dels materials biestables més importants que es coneixen està constituït per dímers tipus  $\pi$  de radicals butil-spirobifenalenil (butil-SBP). La transició de fase d'aquest material, que té lloc a 335 K amb un cicle d'histèresi de 25 K d'amplada, ve acompanyada per canvis en les propietats òptiques, magnètiques i conductores del material. En aquest estudi computacional es va demostrar que aquesta transició de fase consisteix en una transició de spin dels dímers  $\pi$  acoblada amb una transició d'ordre-desordre dels grups butil enllaçats als fenalenils. Per sota de 335 K, el substituent metil adopta una conformació *gauche*, mentre que per sobre de 335 K, el grup metil adopta una conformació *anti* i presenta desordre dinàmic. El canvi conformacional *gauche*  $\rightarrow$  *anti* desencadena la transició de spin dels dímers  $\pi$  i és responsable de la histèresi observada en la transició de fase. Els nostres resultats demostren que l'acoblament entre una transició de spin i una transició conformacional constitueix una estratègia prometedora per al disseny de nous materials biestables.

**When Anatase Nanoparticles Become Bulklike: Properties of Realistic TiO<sub>2</sub> Nanoparticles in the 1–6 nm Size Range from All Electron Relativistic Density Functional Theory Based Calculations**

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

*J. Chem. Theory Comput.*, 13 (2017) 1785.



Models realistes de nanopartícules de TiO<sub>2</sub> emprats per estudiar la convergència de les propietats en funció de la grandària cap al límit del sòlid estès.

Càlculs de la teoria del funcional de la densitat relativistes i amb tots els electrons en nanopartícules de anatasa TiO<sub>2</sub> amb diàmetres entre 1 i 6 nm, tallades seguint les construccions de Wulff (Figura), mostren que les seves propietats electròniques presenten una clara tendència convergent vers els valors del interior del material conforme la grandària augmenta, d'altra banda altament influenciable per el funcional emprat. Les propietats d'estructura electrònica i reactivitat de les nanopartícules més grans son similars a partícules de mesoescala i sistemes d'interior. Es mostren proves que les nanopartícules de anatasa arriben a un comportament d'interior a una grandària de uns 20 nm.

**The photophysics of naphthalene dimers controlled by sulfur bridge oxidation**

C. Climent, M. Barbatti, M. O. Wolf, C. J. Bardeen, D. Casanova.

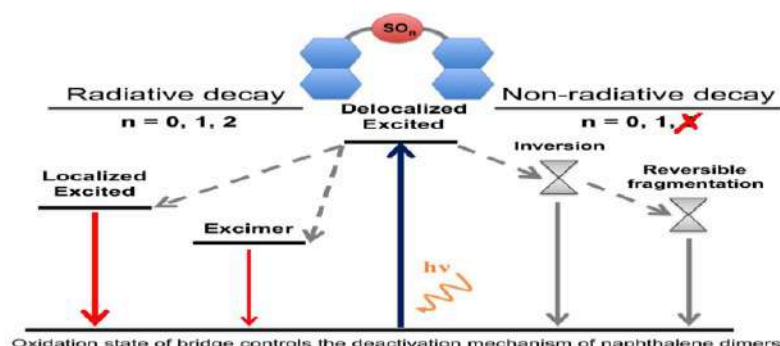
**Chem. Sci.** 8 (2017) 4941-4950.

Diagrama de Jablonski esquemàtic dels dímers covalents de naftalè segons l'estat d'oxidació del sofre del pont (S, SO, SO<sub>2</sub>).

En aquest treball hem investigat la fotofísica de dímers de naftalè enllaçats covalentment per un àtom de sofre. Hem explorat i racionalitzat com l'estat d'oxidació de l'àtom de sofre del pont influeix directament la fotoluminescència del dímer modificant els mecanismes de relaxació radiatius i no-radiatius. En particular, discutim com l'oxidació controla la transferència electrònica entre les dues unitats de naftalè així com la participació del pont SO<sub>n</sub> en les transicions electròniques. Hem identificat els parells d'electrons no enllaçants del sofre com a actors principals en la relaxació no radiativa dels dímers excitats de sulfur i sulfòxid, que té lloc a través d'una intersecció cònica. Concretament, s'han identificat dos tipus d'interseccions còniques en aquests dímers, relacionades amb la inversió piramidal fotoinduída i la fragmentació reversible de dímers arílics de sulfòxid. Els resultats obtinguts i les conclusions són prou generals per a ser extrapolades a altres dímers conjugats amb un pont basat en sofre, per tant proporcionant noves estratègies de disseny de molècules orgàniques fortament fotoluminescents amb transferència de càrrega controlada.

## Oxide-based nanomaterials for fuel cell catalysis: The interplay between supported Pt atoms and particles

Y. Lykhach, A. Bruix, S. Fabris, V. Potin, I. Matolínová, V. Matolín, J. Libuda, K. M. Neyman.

*Catal. Sci. Technol.*, 7 (2017) 4315.



Imatge de portada del número temàtic sobre Catàlisi amb àtom aïllats que il·lustra la interacció d'àtoms de Pt en òxid de ceri en el catalitzador en repòs i petits clústers de Pt formats per àtoms individuals en condicions de la cel·la de treball del combustible per a la dissociació i oxidació de H<sub>2</sub>.

El concepte de la catàlisi amb àtoms individuals ofereix una màxima eficiència de

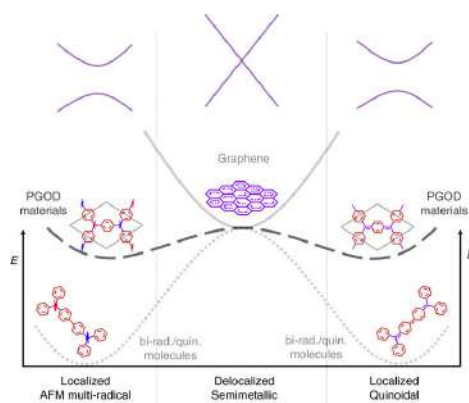
metalls nobles en materials catalítics a baix cost. Vàrem presentar els nostres esforços experimentals i de modelització teòrica per fabricar i caracteritzar un àtom com a catalitzador anòdic en cel·les de combustible nanoestructurades sobre òxid de ceri. El notable rendiment i durabilitat d'aquests catalitzadors amb una molt baixa càrrega de Pt està relacionada amb la interacció entre dos estats associats, un estat de Pt atòmicament dispers sobre òxid de ceri, i una altre de partícules subnanomètriques de Pt. Aquests dos estats resulten de interaccions fortes entre Pt i el òxid de ceri nanoestructurat que produeixen espècies atòmiques de Pt sota condicions oxidants i petites partícules de Pt sota condicions reductores. El lloc plano-quadrat del O<sub>4</sub> en petites superfícies {100} és l'element estructural clau en la superfície de nanopartícules de òxid de ceri on el Pt atòmic s'ancora com Pt<sup>2+</sup>. La conversió d'espècies Pt<sup>2+</sup> a partícules de Pt es desencadenada per un procés redox de Ce<sup>4+</sup>/Ce<sup>3+</sup>. La abundància de llocs d'absorció similars a aquells en les terrasses {100} determinen la càrrega ideal (màxima) de Pt en les capes de Pt-CeO<sub>x</sub> que encara permeten el intercanvi reversible entre àtoms de Pt i petites partícules produint una alta activitat i durabilitat de catalitzadors intel·ligents durant el procés de la cel·la de combustible.



**Existence of multi-radical and closed-shell semiconducting states in post-graphene organic Dirac materials**

I. Alcón, F. Viñes, I. de P. R. Moreira, S. T. Bromley.

**Nature Commun.**, 8 (2017) 1957.

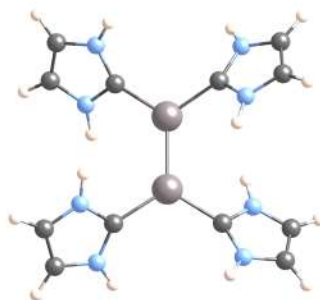


La manca de control de les bandes en el grafè restringeix severament el seu ús en nanoelectrònica. En aquest estudi hem predit que els materials orgànics post-grafènics amb conus de Dirac han de permetre una sintonització electrònica excepcional entre semimetalls tipus grafè i estats semiconductors de múltiples capes i capes tancades.

**Zn-Zn double bonds, a theoretical study**

J. Echeverría, A. Falceto, S. Alvarez.

**Angew. Chem. Int. Ed.**, 56 (2017) 10151.



Zn-Zn dobles enllaços no existents pronosticats computacionalment.

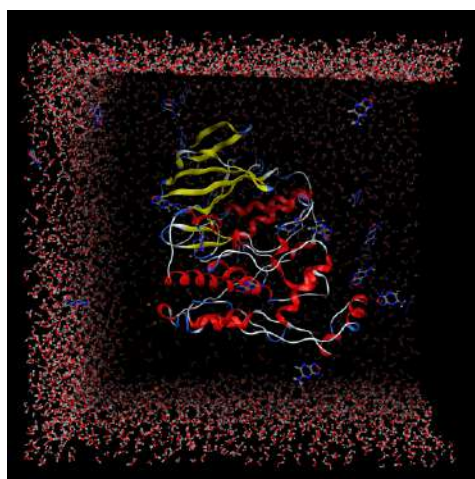
Si bé es coneixen enllaços dobles pels metalls de transició dels grups 9 i 10, així com per al bor i els elements del bloc p dels grups 14 al 16, el Zn es troba en una petita regió de la taula periòdica en que no hi ha enllaços dobles. Un raonament qualitatiu suggereix que el Zn zerovalent té capacitat de formar enllaços dobles Zn=Zn. El treball computacional presentat en aquest article dóna suport a aquesta proposta.

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

#### Identification of Potential Small Molecule Binding Pockets in p38 $\alpha$ MAP kinase

P. Gomez-Gutierrez, J. Rubio-Martinez, J. J. Perez.

*J. Chem. Inf. Model.*, 57 (2017) 2566.



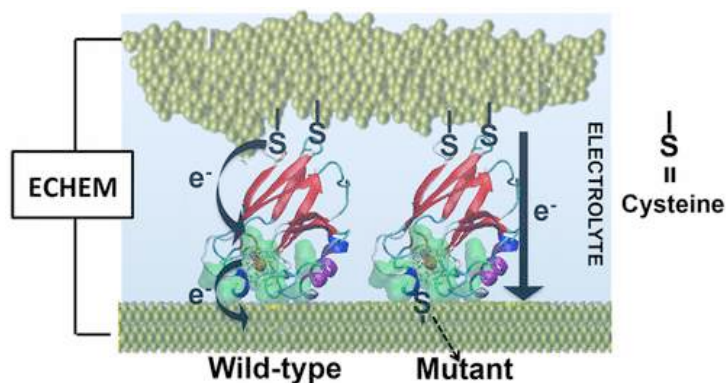
Cercant butxaques d'unió mitjançant dinàmica molecular.

Donat el paper essencial que tenen les proteïnes quinases en la regulació de les vies cel·lulars, la seva desregulació pot provocar l'aparició o progressió de diverses malalties humanes. L'anàlisi estructural de diverses proteïnes quinases suggereix que aquestes proteïnes presenten una notable plasticitat. El present treball presenta els resultats d'un estudi de cribratge en silici dirigit a identificar nous llocs prospectius d'unió al·lostèrica en la paradigmàtica p38 $\alpha$  MAP quinasa. El procés es va realitzar mitjançant un conjunt de estructures generat a partir d'una dinàmica molecular accelerada de 6  $\mu$ s. El procediment permet identificar diversos llocs al·lostèrics de la p38 $\alpha$  que ja es van descriure a la bibliografia, incloent-hi la butxaca DFG, la butxaca d'unió de lípids, el lloc DEF, la ranura d'acoblament, els llocs CD i ED, el lloc posterior i un lloc nou recentment informat : el lloc regulador d'A-loop. A més, l'estudi també va permetre identificar deu nous llocs prospectius al·lostèrics.

### Bioengineering a Single-Protein Junction

M. P. Ruiz, A. C. Aragonès, N. Camarero, J. G. Vilhena, M. Ortega, L. A. Zotti, R. Pérez, J. C. Cuevas, P. Gorostiza, I. Díez-Pérez.

*J. Am. Chem. Soc.*, 139 (2017) 15337.

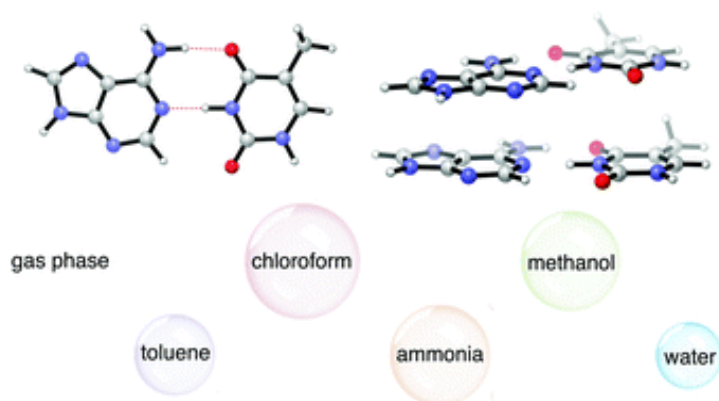


Mostrem aquí el primer exemple de transport de càrrega en un contacte elèctric d'una sola proteïna mutada. Els resultats revelen que una sola mutació a la regió del pegat hidrofòbic de l'Azurina de Cu provoca una distorsió estructural del centre de Cu molt petita i un canvi dramàtic en el règim de transport de càrrega del contacte d'una sola proteïna, passant des del transport clàssic de dos passos mediat pel Cu a un transport de túnel coherent directe. Aquest treball és una prova directa del control del transport de càrrega a través d'una proteïna de transferència electrònica mitjançant processos de mutagènesi externa, així com una plataforma nanomètrica única per estudiar la transferència electrònica biològica.

**B-DNA model systems in non-terran bio-solvents: implications for structure, stability and replication**

T. A. Hamlin, J. Poater, C. Fonseca Guerra, F. M. Bickelhaupt.

*Phys. Chem. Chem. Phys.*, 19 (2017) 16969.

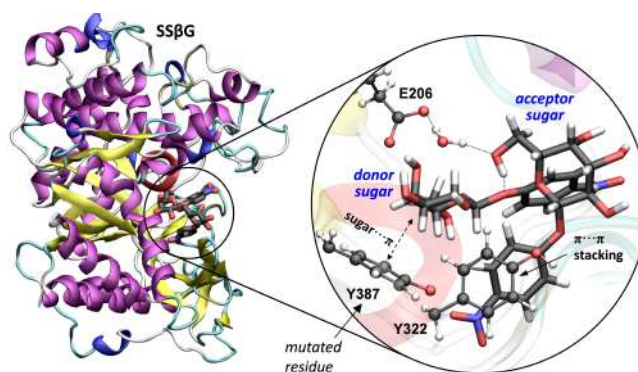


Hem analitzat computacionalment una sèrie de parells de bases Watson-Crick i desordenades de B-ADN, tant en fase gasosa com en diversos solvents, incloent toluè, cloroform, amoníac, metanol i aigua, mitjançant la teoria funcional de la densitat corregida per dispersió. Queda demostrat com la maquinària de reconeixement molecular darrere el codi genètic de la vida depèn del medi, per tal de comprendre la possibilitat o la impossibilitat de viure en llocs exoplanetaris. Els càlculs demostren que un medi no terrestre com l'amoníac, menys polar que l'aigua, presenta una major força dels ponts d'hidrogen, tot i una menor selectivitat cap a la incorporació correcta dels parells de bases de Watson-Crick. Per tant, demostrem la viabilitat de la replicació de l'ADN en un entorn no terrestre.

### A Front-Face ' $S_Ni$ synthase' engineered from a retaining 'double- $S_N2$ ' hydrolase

J. Iglesias-Fernández, S. M. Hancock, S. S. Lee, M. Khan, J. Kirkpatrick, N. J. Oldham, K. McAuley, A. Fordham-Skelton, C. Rovira, B. G. Davis.

**Nat. Chem. Biol.**, 13 (2017) 874.



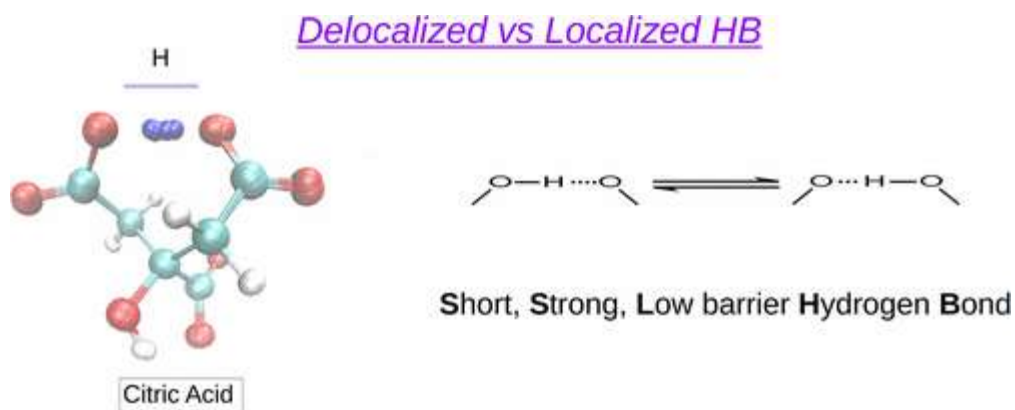
Detall del centre actiu de l'enzim modificat ( $\beta$ -glicosidasa de *Sulfolobus solfataricus*, SS $\beta$ G) amb els dos carbohidrats enllaçats i preparats per a la reacció de síntesi.

La síntesi de sucres o carbohidrats, és important de cara al desenvolupament de tests de diagnòstic, vacunes i nous fàrmacs. La síntesi química convencional en el laboratori és normalment molt costosa i laboriosa, per qual cosa s'estan fent grans esforços per fer-ho mitjançant enzims, que són els catalitzadors naturals. En aquest treball, hem aconseguit modificar un enzim glicosidasa molt robust, que normalment degrada carbohidrats, per a fer el contrari: sintetitzar carbohidrats. La modificació consisteix en la mutació d'un dels amonòacids del centre actiu i la principal novetat és que l'enzim resultant actua mitjançant un mecanisme, anomenat "a una cara" (*front-face* o  *$S_{Ni}$ -like*), que no s'havia observat abans en glicosidases, la qual cosa obre noves possibilitats per a la síntesi de nous carbohidrats. L'ús de tècniques de biologia molecular, juntament amb càlculs teòrics que combinen la dinàmica molecular i la química quàntica, han demostrat el nou mecanisme catalític.

**Ionization and Conformational Equilibria of Citric Acid: Delocalized Proton Binding in Solution**

S. Madurga, M. Nedyalkova, F. Mas, J. L. Garcés.

*J. Phys. Chem. A*, 121 (2017) 5894.



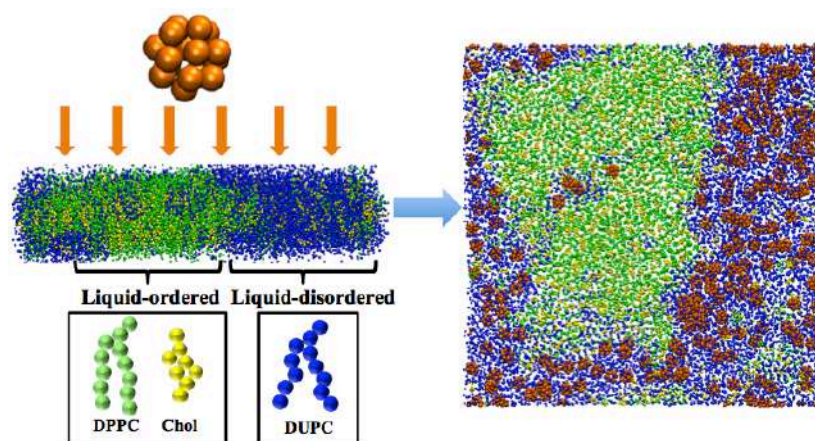
Càlcul de enllaços d'hidrògen localitzats i deslocalitzats a la molècula d'àcid cítric.

La microspecificació de l'àcid cítric s'estudia mitjançant l'anàlisi de dades de valoració NMR utilitzant càlculs *ab initio* i tècniques de mecànica estadística. Amb aquest objectiu, es van realitzar càlculs *ab initio* MP2 en dissolució utilitzant el model de solvent continu i polaritzable SMD i es va determinar completament la roto-microspecció de l'àcid cítric. Els resultats revelen que l'intercanvi del protó a través dels enllaços d'hidrogen es produeix en alguns casos sense barrera energètica. Aquest efecte és especialment rellevant en la forma dionitzada, on totes les conformacions més estables formen un enllaç d'hidrogen de barrera curta, forta i baixa, que de forma conjunta constituïria l'únic microestat detectat per RMN.

**Effects of Fullerene on lipid bilayers displaying different liquid ordering: a coarse-grained molecular dynamics study**

J. Sastre, I. Mannelli, R. Reigada.

**Biochim. Biophys. Acta - General Subjects, 1861 (2017) 2872.**



Les nostres simulacions demostren que les membranes lipídiques amb separació de fases acumulen el ful·lerè en els seus dominis més desordenats. Això pot tenir conseqüències en l'activitat de membranes biològiques i en la bioacumulació del ful·lerè als éssers vius.

Els efectes tòxics i l'impacte mediambiental dels nanomaterials, i en particular del ful·lerè, són tema de preocupació. Reportem una sèrie de simulacions en dinàmica molecular per l'estudi de la interacció entre molècules de ful·lerè amb membranes lipídiques simples. També estudiem l'addició de partícules de ful·lerè a membranes ternàries amb segregació de fase en el context del model de lípid "rafts" com a model d'organització de la membrana cel·lular. L'addició de ful·lerè modifica les propietats estructurals de la membrana lipídica (gruix, àrea i ordre intern), així com les propietats dinàmiques (difusió molecular i bescanvi de colesterol entre capes). És rellevant observar com en membranes lipídiques amb separació de fases, el ful·lerè s'acumula preferentment en aquells dominis més desordenats, fet que podria tenir repercussió en l'activitat biològica de la membrana cel·lular i en la bioacumulació del ful·lerè en els organismes vius.

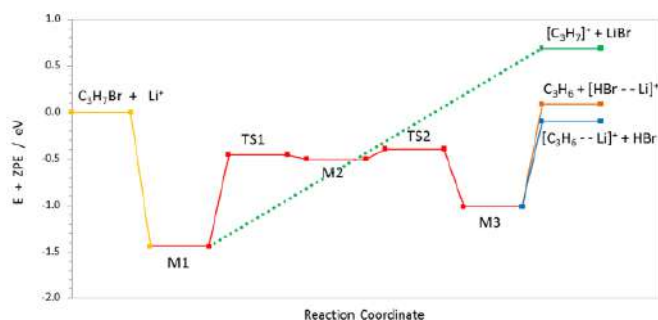


## LÍNIA 4. REACTIVITAT I DINÀMICA DE REACCIONS

The role of  $\text{Li}^+$  ions in the gas phase dehydrohalogenation and dehydration reactions of  $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{Br}$  and  $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{OH}$  molecules studied by radiofrequency-guided ion beam techniques and *ab initio* methods

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

*J. Chem. Phys.*, 146 (2017) 134301.



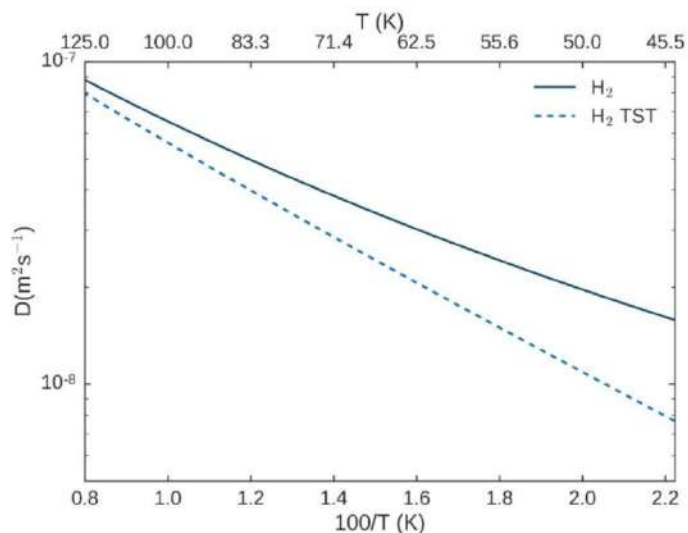
Perfil esquemàtic de les energies de punt zero al llarg de la reacció dels diversos punts estacionaris (mínims i estats de transició) caracteritzats a nivell *ab initio* MP2 per l'estat singlet fonamental del sistema reactiu  $\text{Li}^+ + i\text{-C}_3\text{H}_7\text{Br}$ . Les energies dels diferents mínims (M) i estats de transició (ET) sobre la SEP són respecte de reactius i es mostra la seva connectivitat amb el mètode IRC.

Les reaccions d'eliminació juguen un paper important en la obtenció de hidrocarburs insaturats i en fase gas els ions alcalins mostren una alta reactivitat en comparació al caràcter passiu respecte a les seves dissolucions. En aquest treball s'han estudiat experimentalment les reaccions d'eliminació d' $\text{H}_2\text{O}$  i d' $\text{HBr}$  induïdes pels ions  $\text{Li}+(^1\text{S}_0)$  col·lisions amb  $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{Br}$  i  $i\text{-C}_3\text{H}_7\text{OH}$  als respectius estats electrònics fonamentals i en condicions de col·lisió única tot emprant la tècnica de feixos guiats per radiofreqüència (RF-GIB) i caracteritzant el productes de reacció per espectrometria de masses. Els experiments s'han realitzat dintre de l'interval d'energies al centre de masses de 0.010 a 10.00 eV. Per aquests sistemes reactius l'anàlisi per espectrometria de masses ha permès caracteritzar la formació  $[\text{C}_3\text{H}_6\text{-Li}]^+$ ,  $[\text{HBr-Li}]^+$ ,  $[\text{H}_2\text{O-Li}]^+$ ,  $\text{C}_3\text{H}_7^+$  i l'adducte i transitori  $[\text{Na} - i\text{-C}_3\text{H}_7\text{Br}]^+$ . Per a tots el productes caracteritzats es mesuraren les corresponents funcions d'excitació en unitats absolutes lo qual permet obtenir a partir d'elles les corresponents constants de velocitat de formació a 303.2 K. Mitjançant càlculs *ab initio* a nivell MP2 s'ha obtingut informació rellevant sobre les superfícies de potencial (SEP) on les reaccions d'eliminació i també de descomposició tenen lloc de manera adiabàtica, caracteritzant-se els mínims i els estats de transició connectats al llarg de l'IRC. Les característiques topològiques de les SEP permeten interpretar els resultat experimentals obtinguts així com l'efecte catalític del ions liti a les reaccions d'eliminació.

### Quantum dynamics of H<sub>2</sub> in a carbon nanotube: Separation of time scales and resonance enhanced tunneling

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

*J. Chem. Phys.*, 147 (2017) 084103.

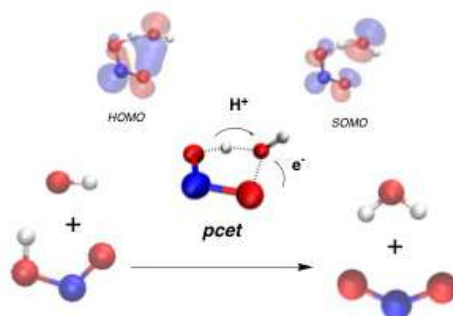


Constant de Difusió per a H<sub>2</sub> confinat en un nanotub de carboni (8,0) calculades amb TST (línia puntejada) i mitjançant funcions de correlació de flux (línia sòlida).

S'estudia la difusió de l'H<sub>2</sub> en un nanotub de carboni estret, (8,0), en el límit de baixa pressió i fent servir eines de dinàmica quàntica. Els coeficients de transmissió per a l'etapa elemental del transport es calculen a través de funcions de correlació de flux, i les constants de difusió s'obtenen usant el model de salt únic. S'aprofita la diferent escala de temps associada al moviment en les coordenades confinades i al moviment al llarg del nanotub per a desenvolupar una representació diabàtica exacta. Una aproximació adiabàtica al sistema, separant la dinàmica de les coordenades confinades i lliures, concorda quasi perfectament amb la simulació numèricament exacta. Usant-la estudiem les dinàmiques fins a 20 ps. L'efecte túnel millorat per ressonància es mostra com al factor dominant del transport a baixes energies, incrementant la constant de difusió a T < 120 K.

**The Atmospheric Oxidation of HONO by OH, Cl, and ClO Radicals**

J. M. Anglada, A. Solé.

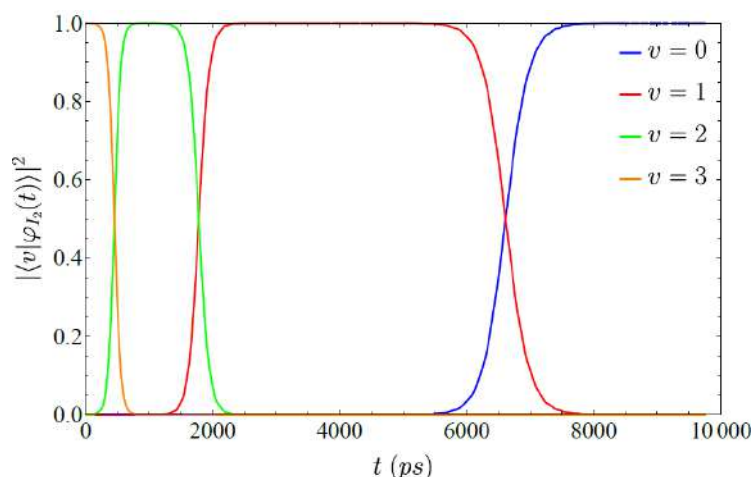
**J. Phys. Chem. A** 121 (2017) 9698.

S'ha investigat l'oxidació atmosfèrica de l'àcid nitrós pel radical hidroxil, l'àtom de clor i el radical monòxid de clor amb mètodes teòrics d'alt nivell. L'àcid nitrós té dos conformadors (cis i trans) i hem trobat un camí de reacció per l'oxidació de cada un d'aquests conformadors amb els radicals considerats. En tots els casos, l'oxidació del conformador cis, és molt més favorable que l'oxidació del conformador trans. Curiosament tots els estats de transició en aquests processos d'oxidació segueixen un mecanisme "proton coupled electron transfer". La nostra constant de velocitat calculada a 298 K per la reacció cis-HONO +  $\cdot\text{OH}$  és  $4.83 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ molècula}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , en excel·lent acord amb els seus valors experimentals ( $4.85 \times 10^{-12}$  i  $6.48 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ molècula}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ). Per la reacció trans-HONO +  $\cdot\text{OH}$  la nostra constant de velocitat calculada a 298 K és  $9.05 \times 10^{-18} \text{ cm}^3 \text{ molècula}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , i hem calculat una constant de velocitat efectiva per l'oxidació de tot l'àcid nitrós amb el radical hidroxil de  $1.81 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ molècula}^{-1} \text{ s}^{-1}$ . Per l'oxidació de l'àcid nitrós per l'àtom de clor hem predit unes constants de velocitat més grans ( $7.38 \times 10^{-11}$ ,  $3.33 \times 10^{-15}$ , i  $2.76 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ molècula}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , per als conformadors cis i trans i per al HONO total), resultats que suggereixen que aquesta reacció ha de contribuir a l'oxidació troposfèrica de l'àcid nitrós, especialment en les zones limítrofes marines, i a la formació de l'ozó troposfèric. Per l'oxidació de l'àcid nitrós per monòxid de clor, hem predit que les constants de velocitat són aproximadament 6 ordres de magnitud més petites que per l'oxidació per l'àtom de clor, i per tant, considerem que aquest procés hauria de tenir un paper menor en la troposfera.

### Vibrational energy relaxation dynamics of diatomic molecules inside superfluid helium nanodroplets. The case of the I<sub>2</sub> molecule

A. Vilà, M. Paniagua, M. González.

Phys. Chem. Chem. Phys. doi: 10.1039/c7cp05694j

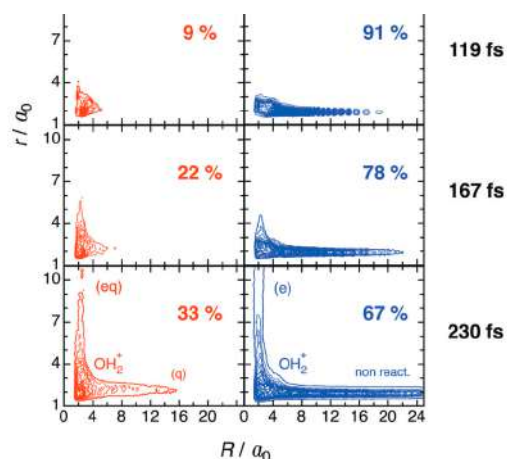


Evolució temporal de les poblacions vibracionals per a l'excitació inicial de la molècula de I<sub>2</sub> a  $v=3$ .

S'ha estudiat la relaxació d'energia vibracional (VER) d'una molècula X<sub>2</sub> en una nanogota de <sup>4</sup>He superfluid (HeND;  $T = 0.37$  K) adaptant un mètode quàntic híbrid proposat per nosaltres. En la primera aplicació es va examinar la molècula I<sub>2</sub> i aquest treball correspon a la primera investigació teòrica sobre VER de molècules dins de HeND. La relaxació global des de l'estat excitat inicial  $v$  fins a l'estat fonamental ( $v = 0$ ) succeeix a l'escala de ns i la VER es produeix segons un mecanisme de cascada, on només es pot produir una relaxació arbitrària, per exemple,  $v-1 \rightarrow v-2$ , una vegada que l'anterior s'ha produït. Aquest mecanisme es pot comprendre una vegada que els valors dels elements de la matriu d'acoblament van ser analitzats. A més, l'evolució temporal de les poblacions de dos nivells vibracionals consecutius es va descriure adequadament amb un Hamiltonià model no lineal a dos estats. Esperem que aquest primer treball teòric sobre la dinàmica de la VER molecular en HeND encoratgi els investigadors a estudiar aquest important procés sobre el qual encara coneixem molt poc.

**Nonadiabatic Renner-Teller quantum Dynamics of OH(X<sup>2</sup>Π) + H<sup>+</sup> reactive collisions**

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

**Phys. Chem. Chem. Phys.**, 19 (2017) 4454.

Densitat del paquet d'ones a tres temps físics sobre la superfície fonamental X<sup>1</sup>A' (vermell) i la primera excitada A<sup>1</sup>A' (blau) per  $J = 10$ ,  $p = +$  i  $K_0 = 0$ .

S'ha realitzat l'estudi no adiabàtic de les reaccions  $\text{OH}(X^2\Pi) + \text{H}^+ \rightarrow \text{OH}'(X^2\Pi) + \text{H}^+$ , intercanvi,  $\rightarrow \text{OH}^+(X^3\Sigma^-) + \text{H}'(^2\text{S})$ , *quenching*, i  $\rightarrow \text{OH}' + (X^3\Sigma^-) + \text{H}(^2\text{S})$ , intercanvi-*quenching* mitjançant el mètode dinàmic quàntic dels paquets d'ona reals i tenint en compte els acoblaments Renner-Teller entre les dos superfícies d'energia potencial que correlacionen els reactius i els productes, la fonamental X<sup>2</sup>A' i la primera excitada A<sup>2</sup>A' del OH<sub>2</sub><sup>+</sup>. En l'estudi s'han obtingut probabilitats de reacció per estats específics de reactius, seccions eficaces i constants de velocitat, a més d'un anàlisi del mecanisme microscòpic. Els resultats constaten que els canals no adiabàtics de *quenching* i intercanvi-*quenching* són molt més reactius que el canal adiabàtic d'intercanvi, i que la reactivitat dels canals de *quenching* és similar, contribuint amb un 97% a la reactivitat global del sistema.

## III.2 LLISTA DE PUBLICACIONS

ARTICLES PUBLICATS

---

1. *Two-dimensional crystal CuS-electronic and structural properties.*  
A. L. Soares Jr., E. C. dos Santos, A. Morales-Garcia, T. Heine, H. A. de Abreu, H. A. Duarte.  
**2D Mater.**, 4 (2017) 015041.
2. *Effective and highly selective CO generation from CO<sub>2</sub> using a polycrystalline  $\alpha$ -Mo<sub>2</sub>C catalyst.*  
X. Liu, C. Kunkel, P. Ramírez de la Piscina, N. Homs, F. Viñes, F. Illas.  
**ACS Catalysis** 7 (2017) 4323.
3. *Quantitative coordination-activity relations for the design of enhanced Pt catalysts for CO electro-oxidation.*  
F. Calle-Vallejo, M. D. Pohl, A. S. Bandarenka.  
**ACS Catalysis** 7 (2017) 4355.
4. *Structure- and coverage-sensitive mechanism of NO reduction on platinum electrodes.*  
I. Katsonauros, M. C. Figueiredo, X. Chen, F. Calle-Vallejo, M. T. M. Koper.  
**ACS Catalysis** 7 (2017) 4660.
5. *Accounting for bifurcating pathways in the screening for CO<sub>2</sub> reduction catalysts.*  
F. Calle-Vallejo, M. T. M. Koper.  
**ACS Catalysis** 7 (2017) 7346.
6. *1,6-Cyclophellitol cyclosulfates: a new class of irreversible glycosidase inhibitor.*  
M. Artola, L. Wu, M. J. Ferraz, C.-L. Kuo, L. Raich, I. Z. Breen, W. A. Offen, J. D. C. Codée, G. A. van der Marel, C. Rovira, J. M. F. G. Aerts, G. J. Davies, H. S. Overkleeff.  
**ACS Centr. Sci.**, 3 (2017) 784–793.
7. *Precise probing of residue roles by post-translational  $\beta,\gamma$ -C,N aza-Michael mutagenesis in enzyme active sites.*  
J. Dadová, K.-J. Wu, P. G. Isenegger, J. C. Errey, G. J. L. Bernardes, J. M. Chalker, L. Raich, C. Rovira, B. G. Davis.  
**ACS Centr. Sci.**, 3 (2017) 1168–1173.
8. *Redox-induced gating of the exchange interactions in a single organic diradical.*  
R. Gaudenzi, J. De Bruijckere, D. Reta, I. d. P. R. Moreira, C. Rovira, J. Veciana, H. S. J. Van der Zant, E. Burzurí.  
**ACS Nano** 11 (2017) 5879-5883.
9. *Iron oxide nanoparticles - in vivo/in vitro biomedical applications and in silico studies.*  
M. Nedyalkova, B. Donkova, J. Romanova, G. Tzvetkov, S. Madurga, V. Simeonov.  
**Adv. Colloid Interface Sci.**, 249 (2017) 192-212.

10. *Spectroscopic observation of a hydrogenated CO dimer intermediate during CO reduction on Cu(100) electrodes.*  
E. Pérez-Gallent, M. C. Figueiredo, F. Calle-Vallejo, M. T. M. Koper.  
**Angew. Chem. Int. Ed.**, 56 (2017) 3621.
11. *Zn-Zn double bonds, a theoretical study.*  
J. Echeverría, A. Falceto, S. Alvarez.  
**Angew. Chem. Int. Ed.**, 56 (2017) 10151-10155.
12. *Nucleation of small silicon carbide dust clusters in AGB stars.*  
D. Gobrecht, S. Cristallo, L. Piersanti, S. T. Bromley.  
**Astrophys. J.**, 840 (2017) 117.
13. *The catalase activity of catalase-peroxidases is modulated by changes in the pKa of the distal histidine.*  
M. Machuqueiro, B. Victor, J. Switala, J. Villanueva, C. Rovira, I. Fita, P. C. Loewen.  
**Biochemistry** 56 (2017) 2271–2281.
14. *Effects of fullerene on lipid bilayers displaying different liquid ordering: a coarse-grained molecular dynamics study.*  
J. Sastre, I. Mannelli, R. Reigada.  
**Biochim. Biophys. Acta – General Subjects** 1861 (2017) 2872-2882.
15. *Exploring the stability and reactivity of Ni<sub>2</sub>P and Mo<sub>2</sub>C catalysts using ab initio atomistic thermodynamics and conceptual DFT approaches.*  
A. Morales-Garcia, J. He, P. Lyu, P. Nachtigall.  
**Biomass Conv. Bioref.**, 7 (2017) 377.
16. *Functionalization of  $\gamma$ -graphyne by transition metal adatoms.*  
S. Kim, A. Ruiz Puigdollers, P. Gamallo, F. Viñes, J. Y. Lee.  
**Carbon** 120 (2017) 63.
17. *DFT study of the role of N- and B-doping on structural, elastic and electronic properties of  $\alpha$ -,  $\beta$ - and  $\gamma$ -graphyne.*  
A. Ruiz-Puigdollers, P. Gamallo.  
**Carbon** 114 (2017) 301.
18. *Carbon dissolution and segregation in platinum.*  
P. Janthon, F. Viñes, J. Sirijaraense, J. Limtrakul, J. Y. Lee.  
**Catal. Sci. Technol.**, 7 (2017) 807.
19. *Oxide-based nanomaterials for fuel cell catalysis: the interplay between supported Pt atoms and particles.*  
Y. Lykhach, A. Bruix, S. Fabris, V. Potin, I. Matolínová, V. Matolín, J. Libuda, K. M. Neyman.  
**Catal. Sci. Technol.**, 7 (2017) 4315-4345.

20. *Highly active Au/ $\delta$ -MoC and Au/ $\beta$ -Mo<sub>2</sub>C catalysts for the low-temperature water gas shift reaction: effects of the carbide metal/carbon ratio on the catalyst performance.*  
S. Posada-Pérez, R. A. Gutiérrez, Z. Zuo, P. J. Ramírez, F. Viñes, P. Liu, F. Illas, J. A. Rodríguez.  
**Catal. Sci. Technol.**, 7 (2017) 5332.
21. *Surface composition changes of CuNi-ZrO<sub>2</sub> catalysts during methane decomposition: an operando NAP-XPS and density functional study.*  
A. Wolfbeisser, G. Kovács, S. M. Kozlov, K. Föttinger, J. Bernardi, B. Klötzer, K. M. Neyman, G. Rupprechter.  
**Catal. Today** 283 (2017) 134-143.
22. *Conformational analysis of the mannosidase inhibitor kifunensine: a quantum mechanical and structural approach.*  
A. Males, L. Raich, S. J. Williams, C. Rovira, G. J. Davies.  
**ChemBioChem** 18 (2017) 1496–1501.
23. *A new type of scaling relations to assess the accuracy of computational predictions of catalytic activities applied to the oxygen evolution reaction.*  
L. G. V. Briquet, M. Sarwar, J. Mugo, G. Jones, F. Calle-Vallejo.  
**ChemCatChem** 9 (2017) 1261.
24. *Investigation of easy-plane magnetic anisotropy in P-ligand square-pyramidal Co<sup>II</sup> single ion magnets.*  
K. Mondal, J. Jover, E. Ruiz, S. Konar.  
**Chem. Commun.**, 53 (2017) 5338-5341.
25. *An atypical interaction explains the high-affinity of a non-hydrolyzable S-linked 1,6- $\alpha$ -mannanase inhibitor.*  
T. Belz, Y. Jin, J. Coines, C. Rovira, G. J. Davies, S. J. Williams.  
**Chem. Commun.**, 3 (2017) 9238–9241.
26. *Effect of second-order spin-orbit coupling on the interaction between spin states in spin-crossover systems.*  
C. Sousa, A. Domingo, C. de Graaf.  
**Chem. Eur. J.**, 23 (2017) 1-8.
27. *An unsaturated four-coordinate dimethyl dimolybdenum complex with a molybdenum-molybdenum quadruple bond.*  
N. Curado, M. Carrasco, J. Campos, C. Maya, R. Peloso, A. Rodríguez, E. Ruiz, S. Alvarez, E. Carmona.  
**Chem. Eur. J.**, 23 (2017) 194-205.
28. *Bistability in organic magnetic materials: a comparative study of the key differences between hysteretic and non-hysteretic spin transitions in dithiazolyl radicals.*  
S. Vela, M. B. Reardon, C. E. Jakobsche, M. M. Turnbull, J. Ribas-Ariño, J. J. Novoa.  
**Chem. Eur. J.**, 23 (2017) 3479-3489.



29. *Formation of a trifluorophosphane platinum(II) complex by P-F bond activation of phosphorus pentafluoride with a Pt-O 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.**, 23 (2017) 5948-5952.
30. *Bifunctional tripeptide including a phosphonic acid as Brønsted acid for Michael addition: mechanistic insights.*  
M. Cortes-Clerget, J. Jover, J. Dussart, E. Kolodziej, M. Monteil, E. Migianu-Griffoni, O. Gager, J. Deschamp, M. Lecouvey.  
**Chem. Eur. J.**, 23 (2017) 6654-6662.
31. *Origin of bistability in the butyl-substituted spirobiphenalenyl-based neutral radical material.*  
M. Fumanal, J. J. Novoa, J. Ribas-Ariño  
**Chem. Eur. J.**, 23 (2017) 7772-7784.
32. *Analysis of magnetic anisotropy and the role of magnetic dilution in triggering SMM behaviour in a family of Co<sup>II</sup>-Y<sup>III</sup> dinuclear complexes with easy-plane anisotropy.*  
M. A. Palacios, J. Nehr Korn, E. A. Suturina, E. Ruiz, S. Gómez-Coca, K. Holldack, A. Schnegg, J. Krzystek, J. M. Moreno, E. Colacio.  
**Chem. Eur. J.**, 23 (2017) 11649-11661.
33. *Quantitative estimation of ising-type magnetic anisotropy in a family of C<sub>3</sub> symmetric Co<sup>II</sup> complexes.*  
K. Mondal, J. Jover, E. Ruiz, S. Konar.  
**Chem. Eur. J.**, 23 (2017) 12550-12558.
34. *Molecules designed to contain two weakly coupled spins with a photoswitchable spacer.*  
J. Salinas-Uber, M. Estrader, J. Garcia, P. Lloyd-Williams, A. Sadurní, D. Dengler, J. van Slageren, N. F. Chilton, O. Roubeau, S. J. Teat, J. Ribas-Ariño, G. Aromí.  
**Chem. Eur. J.**, 23 (2017) 13648-13659.
35. *Frustrated Lewis trios and long-range hole interactions: a combined structural and theoretical study of LB-AX<sub>3</sub>---LB and LB---AX<sub>3</sub>---LB (A=B, Al, Ga, In) systems.*  
J. Echeverría.  
**ChemPhysChem** 18 (2017) 2864-2872.
36. *Selectivity for CO<sub>2</sub> over CH<sub>4</sub> on a functionalized periodic mesoporous phenylene-silica explained by transition state theory.*  
C. Kunkel, F. Viñes, M. A. O. Lourenço, P. Ferreira, J. R. B. Gomes, F. Illas.  
**Chem. Phys. Lett.**, 7 (2017) 807.
37. *Design of multi-functional 2D open-shell organic networks with mechanically controllable properties.*  
I. Alcón, D. Reta, I. d. P. R. Moreira, S. T. Bromley.  
**Chem. Sci.**, 8 (2017) 1027-1039.

38. *Why conclusions from platinum model surfaces do not necessarily lead to enhanced nanoparticle catalysts for the oxygen reduction reaction.*  
F. Calle-Vallejo, M. D. Pohl, D. Reinisch, D. Loffreda, P. Sautet, A. S. Bandarenka.  
**Chem. Sci.**, 8 (2017) 2283.
39. *The photophysics of naphthalene dimers controlled by sulfur bridge oxidation.*  
C. Climent, M. Barbatti, M. O. Wolf, C. J. Bardeen, D. Casanova.  
**Chem. Sci.**, 8 (2017) 4941-4950.
40. *Sequential uncaging with green light can be achieved by fine-tuning the structure of a dicyanocoumarin chromophore.*  
A. Gandioso, M. Palau, A. Nin-Hill, I. Melnyk, C. Rovira, S. Nonell, D. Velasco, J. García-Amorós, V. Marchán.  
**ChemistryOpen** 6 (2017) 375–384.
41. *Nature of Ru-NO coordination bond: Kohn-Sham molecular orbital and energy decomposition analysis.*  
R. P. Orenha, M. V. J. Rocha, J. Poater, S. E. Galembeck, F. M. Bickelhaupt.  
**ChemistryOpen** 6 (2017) 410-416.
42. *Global optimisation of hydroxylated silica clusters: a cascade Monte Carlo basin hopping approach.*  
A. Cuko, T. Macia, M. Calatayud, S. T. Bromley.  
**Comp. Theor. Chem.**, 1102 (2017) 38-43.
43. *The Gyrobifastigium, not an uncommon shape in chemistry.*  
S. Alvarez.  
**Coord. Chem. Rev.**, 350 (2017) 3-13.
44. *Surfaces and morphologies of covellite (CuS) nanoparticles by means of: ab initio atomistic thermodynamics.*  
A. Morales-Garcia, J. He, A. L. Soares, H. A. Duarte.  
**CrystEngComm.**, 19 (2017) 3078.
45. *Abundance and strength of M-H...H-C (M = Al, Ga, In) dihydrogen bonds.*  
J. Echeverría.  
**Cryst. Growth Des.**, 17 (2017) 2097.
46. *Group 12 metal complexes of (2-piperazine-1-yl-ethyl)-pyridin-2-yl-methylene-amine: rare participation of terminal piperazine N in coordination leads to structural diversity.*  
S. Purkait, G. Aullón, E. Zangrando, P. Chakraborty.  
**Dalton Trans.**, 46 (2017) 2184-2195.
47. *Dihydrogen Interactions in group 13 compounds.*  
J. Echeverría, G. Aullón, S. Alvarez.  
**Dalton Trans.**, 46 (2017) 2844-2854.

48. *Tailoring electroactive surfaces by non-template molecular assembly. Towards electrooxidation of L-cysteine.*  
M. Santander-Nelli, C. P. Silva, J. Espinoza-Vergara, J. F. Silva, C. F. Olgúin, D. Cortés-Arriagada, J. H. Zagal, F. Mendizabal, I. Díez-Pérez, J. Pavez.  
**Electrochim. Acta** 254 (2017) 201-213.
49. *Structural transformations and adsorption properties of PtNi nanoalloy thin film electrocatalysts prepared by magnetron co-sputtering.*  
O. Brummel, F. Waidhas, I. Khalakhan, M. Vorokhta, G. Kovács, H. A. Aleksandrov, K. M. Neyman, V. Matolín, J. Libuda.  
**Electrochim. Acta** 251 (2017) 427-441.
50. *Brownian dynamics computational model of protein diffusion in crowded media with dextran macromolecules as obstacles.*  
P. M. Blanco, J. L. Garcés, S. Madurga, F. Mas.  
**Entropy** 19 (2017) 105.
51. *Assessing the optimal conditions for surface-mediated disinfection of Influenza A virus solutions.*  
I. Mannelli, D. Janner, F. Sagués, R. Reigada.  
**Environ. Chem.**, 14 (2017) 319-326.
52. *Silylene-induced reduction of  $[Mn_2(CO)_{10}]$ : Formation of a five-coordinate silicon(IV) complex with an O-bound  $[(OC)_4Mn=Mn(CO)_4]^{2-}$  ligand.*  
J. A. Baus, J. Poater, F. M. Bickelhaupt, R. Tacke.  
**Eur. J. Inorg. Chem.**, (2017) 186-191.
53. *Computing free energies of hydroxylated silica nanoclusters: forcefield versus density functional calculations.*  
A. Macia, P. Ugliengo, S. T. Bromley.  
**Inorganics** 5 (2017) 41.
54. *Lattice-solvent effects in the spin-crossover of an Fe(II)-based material. The key role of intermolecular interactions between solvent molecules.*  
M. Fumanal, F. Jiménez-Grávalos, J. Ribas-Ariño, S. Vela.  
**Inorg. Chem.**, 56 (2017) 4474-4483.
55. *Ferromagnetic exchange in bichloride bridged Cu(II) chains: magnetostructural correlations between ordered and disordered systems.*  
S. N. Herringer, C. P. Landee, M. M. Turnbull, J. Ribas-Ariño, J. J. Novoa, M. Polson, J. L. Wikaira.  
**Inorg. Chem.**, 56 (2017) 5441-5454.
56. *Influence of the disposition of the anisotropy axes into the magnetic properties of Mn<sup>III</sup> dinuclear compounds with benzoato derivative bridges.*  
B. García-Cirera, S. Gómez-Coca, M. Font-Bardía, E. Ruiz, M. Corbella.  
**Inorg. Chem.**, 56 (2017) 8135-8146.

57. *Tunable magnetization dynamics through solid-state ligand substitution reaction.*  
L.-F. Wang, J.-Z. Qiu, J.-Y. Hong, Y.-C. Chen, Q.-W. Li, J.-H. Jia, J. Jover, E. Ruiz, J.-L. Liu, M.-L. Tong.  
**Inorg. Chem.**, 56 (2017) 8829-8836.
58. *Models to predict the magnetic properties of single- and multiple-bridged phosphate Cu<sup>II</sup> systems: a theoretical DFT insight.*  
K. Muñoz-Becerra, D. Aravena, E. Ruiz, E. Spodine, N. Soto-Donoso, V. Paredes-Garcia, D. Venegas Yazigi.  
**Inorg. Chem. Front.**, 4 (2017) 509-520.
59. *Zero- and mono-coordinated transition metals in crystal structures: a box full of surprises.*  
S. Alvarez.  
**Inorg. Chim. Acta** 470 (2017) 74-81.
60. *Intermolecular interactions in group 14 hydrides: beyond CH $\cdots$ HC contacts.*  
J. Echeverría, G. Aullón, S. Alvarez.  
**Int. J. Quantum Chem.**, 117 (2017) e25432, 1-15 (doi: 10.1002/qua.25432).
61. *General concepts, assumptions, drawbacks and misuses in kinetic Monte Carlo and microkinetic modelling simulations applied to computational heterogeneous catalysis.*  
H. Prats, F. Illas, R. Sayós.  
**Int. J. Quant. Chem.**, (2017) e25518, 1-14 (doi: 10.1002/qua.25518).
62. *Mechanochemistry on the Müller-Brown surface.*  
W. Quapp, J. M. Bofill.  
**Int. J. Quantum Chem.**, (2017) e25522, 1-14 (doi: 10.1002/qua.25522).
63. *Operative mechanism of hole-assisted negative charge motion in ground states of radical-anion molecular wires.*  
C. Franco, P. Mayorga Burrezo, V. Lloveras, R. Caballero, I. Alcon, S. T. Bromley, M. Mas-Torrent, F. Langa, J. T. Lopez Navarrete, C. Rovira, J. Casado, J. Veciana.  
**J. Am. Chem. Soc.**, 139 (2017) 1027-1039.
64. *Computational design of experiment unveils the conformational reaction coordinate of GH125  $\alpha$ -mannosidases.*  
S. Alonso-Gil, A. Males, P. Z. Fernandes, S. J. Williams, G. J. Davies, C. Rovira.  
**J. Am. Chem. Soc.**, 139 (2017) 1085-1088.
65. *Contribution of shape and charge to the inhibition of a family GH99 endo- $\alpha$ -1,2-mannanase.*  
M. Petricevic, L. F. Sobala, P. Z. Fernandes, L. Raich, A. J. Thompson, G. Bernardo-Seisdedos, O. Millet, S. Zhu, M. Sollogoub, J. Jiménez-Barbero, C. Rovira, G. J. Davies, S. J. Williams.  
**J. Am. Chem. Soc.**, 139 (2017) 1089-1097.

66. *Metal-controlled magnetoresistance at room temperature in single-molecule devices.*  
A. C. Aragonès, D. Aravena, F. J. Valverde-Muñoz, J. A. Real, F. Sanz, I. Díez-Pérez, E. Ruiz.  
**J. Am. Chem. Soc.**, 139 (2017) 5768-5778.
67. *Carba-cyclophellitols are neutral retaining glucosidase inhibitors.*  
T. J. M. Beenakker, D. P. A. Wander, W. A. Offen, M. Artola, L. Raich, M. J. Ferraz, K.-Y. Li, J. H. P. M. Houben, E. R. van Rijssel, T. Hansen, G. A. van der Marel, J. D. C. Codée, J. M. F. G. Aerts, C. Rovira, G. J. Davies, H. S. Overkleeft.  
**J. Am. Chem. Soc.**, 139 (2017) 6534-6537.
68. *Six states switching of redox-active molecular tweezers by three orthogonal stimuli.*  
B. Doistau, L. Benda, J. L. Cantin, L.-M. Chamoreau, E. Ruiz, V. Marvaud, B. Hasenkopf, G. Vives.  
**J. Am. Chem. Soc.**, 139 (2017) 9213-9220.
69. *Bioengineering a single-protein junction.*  
M. P. Ruiz, A. C. Aragonès, N. Camarero, J. G. Vilhena, M. Ortega, L. A. Zotti, R. Pérez, J. C. Cuevas, P. Gorostiza, I. Díez-Pérez.  
**J. Am. Chem. Soc.**, 139 (2017) 15337-15346.
70. *Structure- and potential-dependent cation effects on CO reduction at copper single-crystal electrodes.*  
E. Pérez-Gallent, G. Marcandalli, M. C. Figueiredo, F. Calle-Vallejo, M. T. M. Koper.  
**J. Am. Chem. Soc.**, 139 (2017) 16412.
71. *Identification of potential small molecule binding pockets in p38alpha MAP kinase.*  
P. Gomez-Gutierrez, J. Rubio-Martinez, J. J. Pérez  
**J. Chem. Inf. Model.**, 57 (2017) 2566-2574.
72. *Assessing the ability of DFT methods to describe static electron correlation effects: CO core level binding energies as a representative case.*  
N. Pueyo Bellafont, P. S. Bagus, C. Sousa, F. Illas.  
**J. Chem. Phys.**, 147 (2017) 024106.
73. *Quantum dynamics of H<sub>2</sub> in a carbon nanotube: separation of time scales and resonance enhanced tunneling.*  
M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga, U. Manthe.  
**J. Chem. Phys.**, 147 (2017) 084103.
74. *The role of Li<sup>+</sup> ions in the gas phase 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 molecules studied by radiofrequency-guided ion beams techniques and ab initio methods.*  
E. López, J. M. Lucas, J. de Andrés, M. Albertí, J. M. Bofill, A. Aguilar.  
**J. Chem. Phys.**, 146 (2017) 134301-134312.

75. *An algorithm to locate optimal bond breaking points on a potential energy surface for applications in mechanochemistry and catalysis.*  
J. M. Bofill, J. Ribas-Ariño, S. P. García, W. Quapp.  
**J. Chem. Phys.**, 147 (2017) 152710-152719.
76. *Boron oxide glasses and nanocomposites: synthetic, structural and statistical approach.*  
D. Dimova, S. Pisov, N. Panchev, M. Nedyalkova, S. Madurga, A. Proykova.  
**J. Chem. Phys.**, 146 (2017) 194703.
77. *Modeling hydroxylated nanosilica: testing the performance of ReaxFF and FFSiOH force fields.*  
A. Macia, P. Ugliengo, S. T. Bromley.  
**J. Chem. Phys.**, 146 (2017) 224704.
78. *Performance of the  $G_0W_0$  method in predicting the electronic gap of  $TiO_2$  nanoparticles.*  
A. Morales-García, R. Valero, F. Illas.  
**J. Chem. Theory Comput.**, 13 (2017) 3746-3753.
79. *When anatase nanoparticles become bulk-like: properties of realistic  $TiO_2$  nanoparticles in the 1-6 nm size range from all electron relativistic density functional theory based calculations.*  
A. Morales-García, R. Valero, F. Illas.  
**J. Chem. Theory Comput.**, 13 (2017) 1785-1793.
80. *Computational study of ibuprofen removal from water by adsorption in realistic activated carbons.*  
D. Bahamon, L. Carro, S. Guri, L. F. Vega.  
**J. Colloid Interface Sci.**, 498 (2017) 323.
81. *Predicting core level binding energies shifts: suitability of the projector augmented wave approach as implemented in VASP.*  
N. Pueyo Bellafont, F. Viñes, W. Hieringer, F. Illas.  
**J. Comput. Chem.**, 38 (2017) 518.
82. *Electronic structure of stoichiometric and reduced ZnO from periodic relativistic all electron hybrid density functional calculations using numeric atom-centered orbitals.*  
F. Viñes, F. Illas.  
**J. Comput. Chem.**, 38 (2017) 523.
83. *Systematic study of the effect of HSE functional internal parameters on the electronic structure and band gap of a representative set of metal oxides.*  
F. Viñes, O. Lamiel-Garcia, K. C. Ko, J. Y. Lee, F. Illas.  
**J. Comput. Chem.**, 38 (2017) 781.
84. *Redox-mediated conversion of atomically dispersed platinum to sub-nanometer particles.*  
Y. Lykhach, A. Figueroba, T. Skála, T. Duchoň, N. Tsud, M. Aulická, A. Neitzel, K. Veltruská, K. C. Prince, V. Matolín, K. M. Neyman, J. Libuda.  
**J. Mater. Chem. A** 5 (2017) 9250-9261.

85. *Single-molecule magnetism arising from cobalt(II) nodes of a crystalline sponge.*  
G. Brunet, D. A. Safin, J. Jover, E. Ruiz, M. Murugesu.  
**J. Mater. Chem. C** 5 (2017) 835-841.
86. *Dual emission and multi-stimuli-response in Iridium(III) complexes with aggregation-induced enhanced emission: application for quantitative CO<sub>2</sub> detection.*  
C. Climent, P. Alam, S. S. Pasha, G. Kaur, A. R. Choudhury, I. R. Laskar, P. Alemany, D. Casanova.  
**J. Mater. Chem. C** 5 (2017) 7784-7798.
87. *Insight into electric field-induced rupture mechanism of water-in-toluene emulsion films from a model system.*  
H. Hristov, M. Nedyalkova, S. Madurga, V. Simeonov.  
**J. Mater. Sci. Technol.**, 33 (2017) 535-540.
88. *Effect of the solvent on the conformational behavior of the alanine dipeptide deduced from MD simulations.*  
J. Rubio-Martinez, M. S. Tomas, J. J. Pérez.  
**J. Mol. Graph. Model.**, 78 (2017) 118-128.
89. *Optimal faujasite structures for post combustion CO<sub>2</sub> capture and separation in different swing adsorption processes.*  
H. Prats, D. Bahamón, G. Alonso, X. Giménez, P. Gamallo, R. Sayós.  
**J. of CO<sub>2</sub> Util.**, 19 (2017) 100.
90. *Computational simulation study of the influence of faujasite Si/Al ratio on CO<sub>2</sub> capture by temperature swing adsorption.*  
H. Prats, D. Bahamón, X. Giménez, P. Gamallo, R. Sayós.  
**J. of CO<sub>2</sub> Util.**, 21 (2017) 261.
91. *Experimental and computational evidence for a new paradigm of the structure and reactivity of titanium(IV) enolates.*  
C. Heras, A. Gómez, P. Romea, F. Urpí, J. M. Bofill, I. de P. R. Moreira.  
**J. Org. Chem.**, 82 (2017) 8909-8916.
92. *Stabilization of 2,6-diarylanilinium cation by through-space cation- $\pi$  interactions.*  
J. S. Padial, J. Poater, D. T. Nguyen, P. Tinnemans, F. M. Bickelhaupt, J. Mécinovic.  
**J. Org. Chem.**, 82 (2017) 9418-9424.
93. *Binding of the anticancer drug BI-2536 to human serum albumin. A spectroscopic and theoretical study.*  
J. Fernández-Sainz, P. J. Pacheco-Liñán, J. M. Granadino-Roldán, I. Bravo, A. Garzón, J. Rubio-Martínez, J. Albaladejo.  
**J. Photochem. Photobiol.**, 172 (2017) 77-87.

94. *Analysis of the acting forces in a theory of catalysis and mechanochemistry.*  
W. Quapp, J. M. Bofill, J. Ribas-Ariño.  
**J. Phys. Chem. A** 121 (2017) 2820-2838.
95. *Ionization and conformational equilibria of citric acid: delocalized proton binding in solution.*  
S. Madurga, M. Nedylkova, F. Mas, J. L. Garcés.  
**J. Phys. Chem. A** 121 (2017) 5894-5906.
96. *The atmospheric oxidation of HONO by OH, Cl, and ClO radicals.*  
J. M. Anglada, A. Solé.  
**J. Phys. Chem. A** 121 (2017) 9698-9707.
97. *Theoretical study of the light-induced spin crossover mechanism in  $[\text{Fe}(\text{mtz})_6]^{2+}$  and  $[\text{Fe}(\text{phen})_3]^{2+}$ .*  
C. Sousa, C. de Graaf, A. Rudavskiy, R. Broer.  
**J. Phys. Chem. A** 121 (2017) 9720.
98. *Adding pieces to the CO/Pt(111) puzzle: the role of dispersion.*  
P. Janthon, F. Viñes, J. Sirijaraense, J. Limtrakul, F. Illas.  
**J. Phys. Chem. C** 121 (2017) 3970.
99. *Versatile optimization of chemical ordering in bimetallic nanoparticles.*  
G. Kovács, S. M. Kozlov, K. M. Neyman.  
**J. Phys. Chem. C** 121 (2017) 10803-10808.
100. *Development of interatomic potentials for supported nanoparticles: the Cu/ZnO case.*  
D. Mora-Fonz, T. Lazauskas, S. M. Woodley, S. T. Bromley, C. R. A. Catlow, A. A. Sokol.  
**J. Phys. Chem. C** 121 (2017) 16831-16844.
101. *An empirical, yet practical way to predict the band gap in solids by using density functional band structure calculations.*  
A. Morales-García, R. Valero, F. Illas.  
**J. Phys. Chem. C** 121 (2017) 18862-18666.
102. *Importance of solvation for the accurate prediction of oxygen reduction activities of Pt-based electrocatalysts.*  
Z. D. He, S. Hanselman, Y. X. Chen, M. T. M. Koper, F. Calle-Vallejo.  
**J. Phys. Chem. Lett.**, 8 (2017) 2243.
103. *Size-dependent level alignment between rutile and anatase  $\text{TiO}_2$  nanoparticles: implications for photocatalysis.*  
K. C. Ko, S. T. Bromley, J. Y. Lee, F. Illas.  
**J. Phys. Chem. Lett.**, 22 (2017) 5593-5598.



104. *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.**, 55 (2017) 275-284.
105. *Pharmaceuticals removal from water effluents by adsorption on activated carbons: a Monte Carlo simulation study.*  
 D. Bahamon, L. F. Vega.  
**Langmuir** 33 (2017) 11146.
106. *How hydroxylation affects hydrogen adsorption and formation on nanosilicates.*  
 B. Kerkeni, M-C. Bacchus-Montabonel, S. T. Bromley.  
**Mol. Astrophys.**, 7 (2017) 1-8.
107. *Kekulene: structure, stability and nature of H...H interactions in large PAHs.*  
 J. Poater, J. Paauwe, S. Pan, G. Merino, C. Fonseca Guerra, F. M. Bickelhaupt.  
**Mol. Astrophys.**, 8 (2017) 19-26.
108. *Predicting size-dependent emergence of crystallinity in nanomaterials: titania nanoclusters versus nanocrystals.*  
 O. Lamiel-Garcia, A. Cuko, M. Calatayud, F. Illas, S. T. Bromley.  
**Nanoscale** 9 (2017) 1049-1058.
109. *The molecular mechanism of the ligand exchange reaction of an antibody against a glutathione-coated gold cluster.*  
 V. Rojas-Cervellera, L. Raich, J. Akola, C. Rovira.  
**Nanoscale** 9 (2017) 3121-3127.
110. *Size dependent structural and polymorphic transitions in ZnO: from nanocluster to bulk.*  
 F. Viñes, O. Lamiel-Garcia, F. Illas, S. T. Bromley.  
**Nanoscale** 9 (2017) 10067-10074.
111. *Existence of multi-radical and closed-shell semiconducting states in post-graphene organic Dirac materials.*  
 I. Alcón, F. Viñes, I. d. P. R. Moreira, S. T. Bromley.  
**Nat. Commun.**, 8 (2017) 1957-1965.
112. *Single-molecule electrical contacts on silicon electrodes under ambient conditions.*  
 C. Aragonès, N. Darwish, S. Ciampi, F. Sanz, J. J. Gooding, I. Díez-Pérez.  
**Nat. Commun.**, 8 (2017) 15056.
113. *High conductance values in  $\pi$ -folded molecular junctions.*  
 M. Carini, M. P. Ruiz, I. Usabiaga, J. A. Fernández, E. J. Cocinero, M. Melle-Franco, I. Díez-Pérez, A. Mateo-Alonso.  
**Nat. Comm.**, 8 (2017) 15195.

114. *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.  
**Nat. Chem.**, 9 (2017) 164-170.
115. *A front-face 'S<sub>N</sub>i synthase' engineered from a retaining 'double-S<sub>N</sub>2' hydrolase.*  
J. Iglesias-Fernández, S. M. Hancock, S. S. Lee, M. Khan, J. Kirkpatrick, N. J. Oldham, K. McAuley, A. Fordham-Skelton, C. Rovira, B. G. Davis.  
**Nat. Chem. Biol.**, 139 (2017) 874–881.
116. *Computational materials: open data settled in materials theory.*  
C. Draxl, M. Scheffler, F. Illas.  
**Nature** 548 (2017) 523.
117. *Testing the effectiveness of the isoelectronic substitution principle through the transformation of aromatic osmathiophene derivatives into their inorganic analogues.*  
A. Vasquez-Espinal, J. Poater, M. Solà, W. Tiznado, R. Islas.  
**New J. Chem.**, 41 (2017) 1168-1178.
118. *Total synthesis of (+)-herboxidiene/GEX 1A.*  
Gómez-Palomino, M. Pellicena, K. Krämer, P. Romea, F. Urpí, G. Aullón, J. M. Padrón.  
**Org. Biomol. Chem.**, 15 (2017) 1842-1862.
119. *A global optimization perspective on molecular clusters.*  
J. M. C. Marques, F. B. Pereira, J. K. Llanio-Trujillo, P. E. Abreu, M. Albertí, A. Aguilar, F. Pirani, M. Bartolomei.  
**Phil. Trans. R. Soc. A** 375 (2017) 201601.
120. *Adsorption of CO on the rutile TiO<sub>2</sub>(110) surface: A dispersion-corrected density functional theory study.*  
J. P. Prates Ramalho, F. Illas, J. R. B. Gomes.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.**, 19 (2017) 2487.
121. *Influence of NO and (NO)<sub>2</sub> adsorption on the properties of Fe-N<sub>4</sub> porphyrin-like graphene sheets.*  
E. Ashori, F. Nazari, F. Illas.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.**, 19 (2017) 3201.
122. *Understanding room-temperature pi-dimerisation of radical ions: intramolecular pi-[TTF](2)(2+) in functionalised calix[4]arenes.*  
M. Fumanal, M. Capdevila-Cortada, J. J. Novoa.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.**, 19 (2017) 3807-3819.
123. *Dynamics of the O + H<sub>2</sub><sup>+</sup> → OH<sup>+</sup> + H, OH + H<sup>+</sup> proton and hydrogen atom transfer reactions on the two lowest potential energy surfaces.*  
R. Martínez, M. Paniagua, J. Mayneris-Perxachs, P. Gamallo, M. González.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.**, 19 (2017) 3857.

124. *Nonadiabatic Renner-Teller quantum dynamics of OH(X<sup>2</sup>I) + H<sup>+</sup> reactive collisions.*  
P. Gamallo, S. Akpınar, P. Defazio, C. Petrongolo.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.**, 19 (2017) 4454.
125. *ZnO powders as multi-facet single crystals.*  
F. Haque, S. Chenot, F. Viñes, F. Illas, S. Stankic, J. Jupille.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.**, 19 (2017) 10622.
126. *Mercuriphilic interactions: a theoretical study on the importance of ligands.*  
J. Echeverría, J. Cirera, S. Alvarez.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.**, 19 (2017) 11645-11654.
127. *Methanol–methanol and methanol–water systems: the intermolecular interactions controlling the transition from small clusters to the liquid phase.*  
M. Albertí, A. Amat, A. Aguilar, F. Pirani.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.**, 19 (2017) 16765.
128. *B-DNA model systems in non-terran bio-solvents: implications for structure, stability and replication.*  
T. A. Hamlin, J. Poater, C. Fonseca Guerra, F. M. Bickelhaupt.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.**, 19 (2017) 16969-16978.
129. *Approaching complexity of alkyl hydrogenation on Pd by density functional modelling.*  
H. A. Aleksandrov, S. M. Kozlov, G. N. Vayssilov, K. M. Neyman.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.**, 19 (2017) 21514-21521.
130. *Metal-doped ceria nanoparticles: stability and redox processes.*  
A. Figueroba, A. Bruix, G. Kovács, K. M. Neyman.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.**, 19 (2017) 21729-21738.
131. *Calix[*N*] arene-based polyradicals: enhancing ferromagnetism by avoiding edge effects.*  
D. Reta, I. d. P. R. Moreira, F. Illas.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.**, 19 (2017) 24264-24270.
132. *Bandgap engineering by cationic disorder: case study on AgBiS<sub>2</sub>.*  
F. Viñes, G. Konstantatos, F. Illas.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.**, 19 (2017) 27940.
133. *Fine tuning of optical transition energy of twisted bilayer graphene via interlayer distance modulation.*  
E. del Corro, M. Peña-Alvarez, A. Morales-García, M. Bousa, M. Mračko, R. Kolman, B. Pacakova, L. Kavan, M. Kalbac, O. Frank.  
**Phys. Rev B** 95 (2017) 085138.
134. *ZrO<sub>2</sub> nanoparticles: a density functional theory study of structure, properties and reactivity.*  
A. Ruiz Puigdollers, F. Illas, G. Pacchioni.  
**Rend. Lincei Sci. Fis. Nat.**, 28 (2017) 19.

135. *Continuous symmetry measures: a new tool in quantum chemistry.*  
P. Alemany, D. Casanova, S. Alvarez, C. Dryzun, D. Avnir.  
**Rev. Comput. Chem.**, 30 (2017) 289-352.
136. *'Aggregation induced emission' active iridium(III) complexes with applications in mitochondrial staining.*  
P. Alam, S. Dash, C. Climent, G. Kaur, A. R. Choudhury, D. Casanova, P. Alemany, R. Choudhury, I. R. Laskar.  
**RSC Adv.**, 7 (2017) 5642-5648.
137. *Structural properties, Judd – Ofelt calculations, and near infrared to visible photon up-conversion in Er<sup>3+</sup>/Yb<sup>3+</sup>/doped BaTiO<sub>3</sub> phosphors under excitation at 1500 nm.*  
M. Vega, J. Llanos, P. Alemany, I. R. Martin.  
**RSC Adv.**, 7 (2017) 10529-10538.
138. *Study of the E–Z stilbene isomerisation in perchlorotriphenyl-methane (PTM) derivatives.*  
F. Bejarano, I. Alcon, N. Crivillers, M. Mas-Torrent, S. T. Bromley, J. Veciana, C. Rovira.  
**RSC Adv.**, 7 (2017) 15278-15283.
139. *Direct covalent grafting of an organic radical core on gold and silver.*  
M. R. Ajayakumar, I. Alcon, S. T. Bromley, J. Veciana, C. Rovira, M. Mas-Torrent.  
**RSC Adv.**, 7 (2017) 20076-20083.
140. *Measuring the spin-polarization power of a single chiral molecule.*  
C. Aragonès, E. Medina, M. Ferrer-Huerta, N. Gimeno, M. Teixidó, J. L. Palma, N. Tao, J. M. Ugalde, E. Giralt, I. Díez-Pérez, V. Mujica.  
**Small** 13 (2017) 1602519.
141. *Differential electrochemical conductance imaging at the nanoscale.*  
M. López-Martínez, J. M. Artés, V. Sarasso, M. Carminati, I. Díez-Pérez, F. Sanz, P. Gorostiza.  
**Small** 13 (2017) 1700958.
142. *Adsorption and dissociation of molecular hydrogen on orthorhombic  $\beta$ -Mo<sub>2</sub>C and cubic  $\delta$ -MoC (001) surfaces.*  
S. Posada-Pérez, F. Viñes, R. Valero, J. A. Rodriguez, F. Illas.  
**Surf. Sci.**, 656 (2017) 24-32.
143. *Cohesion and coordination effects on transition metal surface energies.*  
J. Ruvireta, L. Vega, F. Viñes.  
**Surf. Sci.**, 664 (2017) 45.
144. *Substrate-Controlled Aldol Reactions from  $\alpha$ -hydroxy ketones.*  
G. Aullón, P. Romea, F. Urpí.  
**Synthesis** 49 (2017) 484-503.

145. *Substrate-mediated single-atom isolation: dispersion of Ni and La on  $\gamma$ -graphyne.*  
S. Kim, P. Gamallo, F. Viñes, J. Y. Lee, F. Illas.  
**Theor. Chem. Acc.**, 136 (2017) 80.
146. *Modelization of the H<sub>2</sub> adsorption on graphene and molecular dynamics simulation.*  
N. Faginas-Lago, Md Bin Yeamin, J. Sánchez Marín, I. G. Cuesta, M. Albertí, A. Sánchez de Merás.  
**Theor. Chem. Acc.**, 136 (2017) 91.
147. *Atomic ordering and Sn segregation in Pt-Sn nanoalloys supported on CeO<sub>2</sub> thin films.*  
A. Neitzel, G. Kovács, Y. Lykhach, S. M. Kozlov, N. Tsud, T. Skála, M. Vorokhta, V. Matolín, K. M. Neyman, J. Libuda.  
**Top. Catal.**, 60 (2017) 522-532.

CAPÍTOLS DE LLIBRES I PROCEEDINGS

---

1. *De dones, homes i molècules. Notes d'història, art i literatura de la química.*  
S. Alvarez.  
**Edicions UB**, Barcelona (2017), ISBN 978-84-475-3982-6.
2. *2.Diarylplatinum(II) scaffolds for kinetics and-mechanistic studies on the formation of platinacycles via an oxidative addition/reductive elimination/oxidative addition sequence.*  
G. Aullón, M. Crespo, J. Jover, M. Martínez.  
**Adv. Inorg. Chem.** editat per R. van Eldik i C. D. Hubbard, 70, capítol 6, 195-242, Elsevier (2017).
3. *Intermolecular interactions in crystals. Fundamentals of crystal engineering.*  
editat per J. J. Novoa, Royal Society of Chemistry, Regne Unit (2017).
4. *An application of the maximum principle in chemistry: a method to locate transition states.*  
J.M. Bofill, W. Quapp.  
**Theoretical and Quantum Chemistry at the Dawn of the 21st Century** editat per Ramon Carbó-Dorca i Tanmoy Chakraborty, Apple Academic Press Inc., USA (2017).
5. *Modelling enzymatic reaction-diffusion processes in in vivo-like systems.*  
P. M. Blanco, S. Madurga; J. L. Garcés; M. Cascante, F. Mas.  
**Biology for Physics: Is there New Physics in Living Matter?** European Physical Society Ed., ISBN: 979-10-96389-03-2, 20 (2017).
6. *Silicate nanoclusters: understanding their cosmic relevance from bottom-up modelling.*  
S. T. Bromley.  
**Clusters: Structure, Bonding and Reactivity** editat per M. T. Nguyen i B. Kiran, Springer, Suïssa (2017).
7. *Pharmaceuticals removal from water effluents by adsorption in activated carbons using Monte Carlo simulations.*  
D. Bahamon, L. F. Vega.  
**27th European Symposium on Computer Aided Process Engineering** editat per Antonio Espuña, Moisès Graells i Luis Puigjaner, Elsevier, Països Baixos (2017).

### III.3 ALTRES ACTIVITATS

#### TESIS DOCTORALS 2017

---

1. *Ligandos supramoleculares en complejos metálicos con propiedades físicas relevantes.*  
**Lindley Maxwell Villacorta**  
Director/s: E. Ruiz.  
Juny 2017.
2. *Bioengineering single-protein wires.*  
**Marta Pozuelo Ruiz**  
Director/s: I. Díez.  
Juliol 2017.
3. *Theoretical study of excited states in molecules and molecular aggregates relevant for optoelectronic applications.*  
**Clàudia Climent Biescas**  
Director/s: D. Casanova i P. Alemany.  
Juliol 2017.
4. *Density functional modelling of materials for fuel cell catalysts with reduced content of critical components.*  
**Alberto Figueroba Sanchez**  
Director/s: K. Neyman.  
Juliol 2017.
5. *Field-effects on single molecular circuitry. Electronic transport from synthetic to biological models.*  
**Albert Cortijos Aragonés**  
Director/s: F. Sanz i I. Díez.  
Juliol 2017.
6. *Conformational and mechanistic analyses of  $\alpha$  and  $\beta$  glycosidase substrates by ab initio QM/MM methods.*  
**Santiago Alonso Gil**  
Director/s: C. Rovira  
Juliol 2017.
7. *Electrochemical tunneling microscopy and spectroscopy of electron transfer proteins.*  
**Montse López Martínez**  
Director/s: I. Díez.  
Setembre 2017.

8. *Desenvolupament de models per nanopartícules de TiO<sub>2</sub> i ZnO en fotocatalàlisi.*  
**Oriol Lamiel Garcia**  
Director/s: S. Bromley i F. Illas.  
Setembre 2017.
9. *New strategies of inhibition of K-Ras and study of the K-Ras/CaM interaction.*  
**Eduardo Garrido Sagarzazu**  
Director/s: J. Rubio.  
Setembre 2017.

## MÀSTERS 2017

---

1. *Graphene Interaction with Ni(111): Description by Modern Dispersive Forces Approaches.*  
**Helena Muñoz Galán**  
Director/s: F. Viñes  
Màster en Nanociència i Nanotecnologia.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Febrer 2017.
2. *Elucidating the mechanisms of phase transitions in switchable biradical-based magnetic materials.*  
**Julia Schmidt**  
Director/s: J. J. Novoa.  
MSci Chemistry with Spanish for Science.  
Imperial College London.  
Juny 2017.
3. *Computational study of enzyme-substrate interactions in galactosyltransferases.*  
**David Almacellas Salillas**  
Director/s: C. Rovira  
Màster en Química Orgànica.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2017.
4. *Modelling the Michaelis complex of CtCel124 glycosyl hydrolase.*  
**Albert Pla Mas**  
Director/s: C. Rovira.  
Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2017.



5. *On the Accuracy of Density Functionals in Describing Transition Metal Surface Properties.*  
**Lorena Vega Domínguez**  
Director/s: F. Viñes.  
Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2017.
6. *Pressure and temperature effects on the symmetry of the atomic coordination environment in tetrahedral solids.*  
**Xavier Marugan Ferrer**  
Director/s: P. Alemany  
Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2017.
7. *Theoretical and Computational Study of Sulfur Compounds Reactivity in Prebiotic Chemistry: The Whitesides Network of Thiols and Thioesters.*  
**João Miguel dos Santos Nicolau Inês**  
Director/s: I. de P. R. Moreira, J. M. Bofill  
Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Setembre 2017.
8. *On-Lattice Monte Carlo simulation of enzyme kinetics in crowded intracellular environments.*  
**Enric Fortín Foz**  
Director/s: F. Mas.  
Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Setembre 2017.
9. *Modeling enzymatic reaction-diffusion processes in crowded media by Brownian Dynamics simulations.*  
**Marí López Berbel**  
Director/s: F. Mas.  
Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Setembre 2017.

## PARTICIPACIÓ A CONGRESSOS 2017

---

### **1st Biology for Physics: Is there Any Physics in Living Matter?**

Barcelona (Espanya), 15-18 Gener 2017

*Modelling enzymatic reaction-diffusion processes in in vivo-like systems (pòster)*

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

*Dissecting the roles of the aberrant collagen mechanobiology in lung fibrosis and cancer (pòster)*

R. Ikemori, M. Gabasa, M. Puig, A. Giménez, R. Galgoczy, I. Pastor, F. Mas, N. Reguart, A. Vaubet, A. Labernardie, X. Trepát, J. Alcaraz

### **CM1401 COST Meeting: Our Astrochemical History Week**

Faro (Portugal), 16-20 Gener 2017

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

S. T. Bromley

### **MOLESCO Molecular Scale Electronics (3rd Annual Meeting and Workshop)**

Granada (Espanya), 17-21 Gener 2017

*Transport in biological motifs and metalloproteins (conferència convidada)*

I. Díez-Pérez, M. Ruiz

### **The eSSENCE of . . . Computational Chemistry & Physics, CECAM program seminar series**

Uppsala (Suècia), 26 Gener 2017

*Modelling catalytic nanomaterials - as simple as possible, but not simpler (conferència convidada)*

K. M. Neyman

### **II Workshop on Chemistry of Group 11 Elements**

Barcelona (Espanya), 26-27 Gener 2017

G. Aullón (*organització del congrés*)

*Trinuclear gold-carborane as a host structure (pòster)*

G. Aullón, J. M. Oliva, A. Laguna

*Can DFT accurately reproduce reaction yields? A computational study of copper-mediated pentafluoroethylation of benzoic acid chlorides (pòster)*

J. Jover

**The eSSENCE of . . . Computational Chemistry & Physics, CECAM program seminar series**  
Estocolm (Suècia), 27 Gener 2017

*Modelling catalytic nanomaterials - as simple as possible, but not simpler (conferència convidada)*

K. M. Neyman

**8th European Symposium on Computing  $\pi$ -conjugated Compounds (C $\pi$ C)**

Màlaga (Spain), 27-28 Gener 2017

*Influence of the sulfur bridge in the photophysics of covalent naphthalene dimers (comunicació oral)*

C. Climent

**funCOS seminar series**

Erlangen (Alemanya), 30 Gener 2017

*Effect of ionic Pt on the reducibility of Pt/CeO<sub>2</sub> nanocomposites (conferència convidada)*

K. M. Neyman

**5th International Conference on Water, Energy & Environment (ICWEE/5)**

Abu Dhabi (Emirats Àrabs Units), 28 Febrer – 2 Març 2017

*Modeling pharmaceuticals removal from water effluents by adsorption in activated carbons (comunicació oral)*

L. F. Vega, D. Bahamon

**BCA Spring Meeting**

Lancaster (Regne Unit), 11 Abril 2017

*Transition metal coordination polyhedra: shape, spin and secondary bonding (conferència plenària)*

S. Alvarez

**International Conference on Multifunctional, hybrid and nanomaterials**

Lisboa (Portugal), 6-10 Març 2017

*Antimicrobial and biofilm preventing functionalized optical surfaces (pòster)*

M. A. Noyan, R. Sibilo, I. Mannelli, R. Reigada, M. Mazumder, M. Lakadamyali, V. Pruneri

**Department colloquium**

Upton (USA), 20 Març 2017

*Computational design of bimetallic nanocrystals (conferència convidada)*

K. M. Neyman

**Advances in computational and experimental studies of solids: Richard Catlow 70th meeting**

Oxford (Regne Unit), 10-12 Abril 2017

*Size dependent transitions in nano-oxides (comunicació oral)*

S. T. Bromley

**12<sup>th</sup> Carbohydrate Bioengineering Meeting (CBM12)**

Viena (Àustria), 23-26 Abril 2017

*A front-face mechanism 'synthase' engineered from a retaining hydrolase. Mechanistic insight from QM/MM metadynamics (conferència convidada)*

C. Rovira

**CNRS**

Tolosa de Llenguadoc (França), 5 Maig 2017

*Magnetic transition metal complexes: from single-molecule magnets to magnetoresistance single-molecule devices (comunicació oral)*

E. Ruiz

**10<sup>th</sup> European School on Molecular Nanoscience (ESMOLNA)**

San Lorenzo del Escorial (Espanya), 7-12 Maig 2017

*Ferrocene: Old molecule with new relevant physical properties (conferència convidada)*

E. Ruiz

**Aportando valor al CO<sub>2</sub>**

Tarragona (Espanya), 9-10 Maig 2017

*Finding the optimum cation content in faujasites for post-combustion CO<sub>2</sub> capture in swing adsorption processes (comunicació oral)*

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

**Hybrid Quantum Mechanics / Molecular Mechanics (QM/MM) Approaches to Biochemistry and beyond / CECAM-MARVEL QM/MM School**

Lausanne (Suïssa), 15-19 Maig 2017

C. Rovira (organització del congrés)

*The reaction intermediate of GH18 chitinases: substrate conformation and protonation state (pòster)*

J. Coines, M. Alfonso-Prieto, X. Biarnés, A. Planas, C. Rovira

*Catalytic study of  $\beta$ -galactocerebrosidase (pòster)*

A. Nin-Hill, L. Raich, C. Rovira

**Master Química XIII**

Barcelona (Espanya), 17 Maig 2017

*Estudi de l'efecte del crowding macromolecular emprant simulacions de dinàmica browniana (pòster)*

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

**III Russian Congress on Catalysis "Roskataliz-2017"**

Nizhny Novgorod (Rússia), 22-26 Maig 2017

K. M. Neyman (*chairman de sessió científica*)

*Computational engineering of bimetallic catalysts to speed-up their targeted manufacturing (conferència convidada)*

K. M. Neyman

**European Workshop on Theoretical approaches of Molecular Magnetism: Jujols IX,**

Tortosa (Espanya), 22-26 Maig 2017

*Modeling the ligand tuning effect over the transition temperature in spin-crossover systems using density functional methods (conferència convidada)*

E. Ruiz

*Magnetic Fingerprint of Planar Bistable Molecule-Based Magnets (comunicació oral)*

T. Francese

**Cicle Elements de Química a la Literatura, CSIC**

Barcelona (Espanya), 30 Maig 2017

*La química en la literatura: de cites breus a cosmogonies (conferència convidada)*

S. Alvarez

**Máster Oficial Química de Materials Aplicada de la Universitat of Barcelona**

Barcelona (Espanya), 2 Juny 2017

G. Aullón (*coordinador*)

**8th IQTCUB Symposium**

Barcelona (Espanya), 2 Juny 2017

J. Cirera, M. Deumal (*organització del congrés*)

*Cerca del contingut de cations òptim en faujasites per a la captura de CO<sub>2</sub> de post-combustió amb processos d'adsorció tipus swing (pòster)*

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

*Effect of the pressure on the synthesis of ADOR zeolites (comunicació oral)*

A. Morales-Garcia

*Using open-shell molecules to design 2D materials with controllable properties (pòster)*  
I. Alcón, S. T. Bromley

*Study of the effect of macromolecular crowding with brownian dynamics simulations (pòster)*  
M. López, P. M. Blanco, F. Mas, S. Madurga

*Realistic modelling of the nucleation of nanosilicate dust particles using atomistic simulations (pòster)*  
A. Macià, S. T. Bromley

*BCC transition metal surfaces: trends in work functions and surface energies (pòster)*  
L. Vega, F. Viñes

*On-lattice Monte Carlo simulations of enzyme kinetics in crowded intracellular environments (pòster)*  
E. Fortín, S. Madurga, E. Vilaseca, F. Mas

*Study of the effect of macromolecular crowding with brownian dynamics simulations (pòster)*  
M. López, P. M. Blanco, F. Mas, S. Madurga

*Towards a realistic modelling of protein diffusion in polymer crowded media (pòster)*  
P. M. Blanco, S. Madurga, J. L. Garcés, F. Mas

*Angular momentum effects on the  $\text{Ne} + (^4\text{He})_N \rightarrow \text{Ne}@(^4\text{He})_N + (N-N')^4\text{He}$  capture process and quantised vortex formation: a quantum-classical approach (pòster)*  
M. Blancafort, A. Vilà, M. González

*Importance of the tunneling effect on the diffusion of  $\text{H}_2$  along a carbon nanotube (comunicació oral)*  
M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga

### **Nanocosmos Interstellar Dust Meeting**

Toulouse (Francia), 12-13 Juny 2017

*Silicate dust: a bottom-up computational approach (comunicació oral)*  
S. T. Bromley

### **1st ELECFI International Workshop**

Saragossa (Espanya), 12-14 Juny 2017

*Studying chemical reactions at the nanoscale (conferència convidada)*  
I. Díez-Pérez, A. C. Aragonés, N. Darwish

### **4th Conference on Multiscale Modelling of Materials and Molecules**

Uppsala (Suècia), 12-14 Juny 2017

*Computational design of bimetallic nanocrystals (conferència convidada)*  
K. M. Neyman

**Icmat 2017 - Materials Research Society of Singapore**

Singapur (Singapur), 18-23 Juny 2017

*Force Fields in single-molecule wires (conferència convidada)*

I. Díez-Pérez, A. C. Aragonés, N. Darwish

**9th International Conference Engineering of Chemical Complexity (ECC9)**

Vilanova i la Geltrú (Espanya), 19-22 Juny 2017

R. Reigada (organització del congrés)

*Towards a realistic modelling of protein diffusion in polymer crowded media (pòster)*

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

**FemEx-Netherlands, Promoting female excellence in theoretical and computational chemistry**

Putten (Països Baixos), 22-25 Juny 2017

*Spin states in Fe(II) materials (comunicació oral)*

C. Sousa

**XXXVI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química**

Sitges (Espanya), 25-29 Juny 2017

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

E. Ruiz

*Interacciones intermoleculares en hidruros del grupo 13 (pòster)*

J. Echeverría, G. Aullón, S. Alvarez

*Dihydrogen Interactions in group 14 Hydrides (pòster)*

G. Aullón, J. Echeverría, S. Alvarez

*Re-thinking TTTA magnetism: moving from a static to a dynamical computational perspective (pòster)*

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

*The complex mechanochemistry of disulfide bond reduction in alkaline solution (comunicació oral)*

J. Ribas-Ariño

*B-DNA stability and replication in non-terran biosolvents (comunicació oral)*

J. Poater, T.A. Hamlin, C. F. Guerra, F. M. Bickelhaupt

*Everyday analogies to understand difficult concepts: aromaticity (comunicació oral)*

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

*The Baird rule and the aromaticity of low-lying excited states (comunicació oral)*

M. Solà, O. El-Bakouri, J. Poater, F. Feixas

**CECAM meeting “Dopant dynamics in superfluid helium-4 nanodroplets: from statics to time dependent He-DFT”**

Toulouse (França), 25-30 Juny 2017

*Dynamics of chemical processes involving atoms/molecules and superfluid helium nanodroplets (comunicació oral)*

A. Vilà, M. Blancafort, R. Mayol, M. González

*Dynamics and kinetics of low temperature capture processes in  $Rg + H_2^+$  collisions (comunicació oral)*

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

**3rd BOOK-D (Bordeaux Olivier Kahn Discussions)**

Bordeaux (França), 26-27 Juny 2017

*Modelling spin-crossover with theoretical tools: From molecules to metal-organic frameworks (conferència convidada)*

J. Cirera

**Congreso de la Sociedad Española de Catálisis (SECAT17)**

Oviedo (Espanya), 26-28 Juny 2017

*Deactivation of molybdenum carbide catalyst in the hydrodeoxygenation (HDO) of phenol by the presence of water (comunicació oral)*

A. Morales-García, P. Lyu, J. Engelhardt, F. Schüth, P. Nachtigall

*Au/MoC as an efficient catalyst for  $H_2$  production: experiments and theoretical (comunicació oral)*

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

**EuCheMS Inorganic Chemistry Conference (EICC-4)**

Copenhagen (Dinamarca), 2-5 Juliol 2017

*Modelling the ligand fine tuning effect over the transition temperature in spin-crossover systems with density functional methods (comunicació oral)*

J. Cirera

*Can DFT accurately reproduce reaction yields? a computational study of copper-mediated pentafluoroethylation of benzoic acid chlorides (pòster)*

J. Jover

**19th European Carbohydrate Symposium (EUROCARB)**

Barcelona (Espanya), 2-6 Juliol 2017

*Catalytic study of  $\beta$ -galactocerebrosidase (pòster)*

A. Nin-Hill, L.I. Raich, C. Rovira



*Sugar conformational changes and reactivity of carbohydrate-active enzymes. Insight from QM/MM metadynamics simulations (conferència convidada)*

C. Rovira

*The reaction intermediate of GH18 chitinases: substrate conformation and protonation state (pòster)*

J. Coines, M. Alfonso-Prieto, X. Biarnés, A. Planas, C. Rovira

#### **XIV International Workshop on Quantum Reactive Scattering**

Trieste (Itàlia), 3-6 Juliol 2017

*The role of tunneling on the diffusion rate of H<sub>2</sub> and D<sub>2</sub> along a narrow SWCNT (comunicació oral tipus keynote)*

M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga

*Quantum dynamics of H<sub>2</sub> in a carbon nanotube: timescale separation and resonance enhanced tunneling (comunicació oral tipus keynote)*

M. Mondelo-Martell, F. Huarte-Larrañaga

#### **Frontiers of multi-scale modeling in materials, energy & catalysis III**

Heiligenhafen (Alemanya), 3-7 Juliol 2017

*Optimal faujasite structures for post combustion CO<sub>2</sub> separation in swing adsorption processes: a computational study (comunicació oral)*

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

#### **7th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces (RICI7)**

Madrid (Espanya), 4-7 Juliol 2017

*Towards a realistic modelling of protein diffusion in polymer crowded media (pòster)*

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

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

Tarragona (Espanya), 5-6 Juliol 2017

*On-lattice Monte Carlo simulations of enzyme kinetics in crowded intracellular environments (pòster)*

E. Fortín, S. Madurga, E. Vilaseca, F. Mas

#### **XXXVI Biennial Meeting of the Real Sociedad Española de Física**

Santiago de Compostela (Espanya), 17-21 Juliol 2017

*Hydrogen diffusion along SWCNTs: time-scale separation and tunneling effects (comunicació oral)*

F. Huarte-Larrañaga, M. Mondelo-Martell

**Hands-on Workshop Density-Functional Theory and Beyond: Accuracy, Efficiency and Reproducibility in Computational Materials Science**

Humboldt University, Berlin (Alemanya), 31 Juliol – 11 Agost 2017

*First principles study of size, shape, and phase effects on ZnO photocatalyst nanostructures (pòster)*

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

**Swedish Theoretical Chemistry Conference 2017 – Bridging gaps**

Gotemburg (Suècia), 16-18 Agost 2017

*Density-functional modelling of ceria-based nanomaterials for catalysis and energy technologies (comunicació oral tipus keynote)*

K. M. Neyman

**245th ACS National Meeting**

Washington DC (Estats Units), 20-24 Agost 2017

*Could we make shorter Zn-Zn bonds? (conferència convidada)*

S. Alvarez

*Photophysics of naphthalene dimers controlled by the sulfur bridge oxidation (comunicació oral)*

C. Climent

*Effect of temperature on the symmetry of molecules and solids: a continuous symmetry measures study (conferència convidada)*

P. Alemany

*Computational modeling of catalytic metal/metal-oxide nanostructures (conferència convidada)*

K. M. Neyman

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

K. M. Neyman

*Density-functional modeling of materials for single-atom catalysis based on nanostructured ceria (conferència convidada)*

K. M. Neyman

*Catalysis by natural and engineered glycosidases. An atomistic view from QM/MM simulations (conferència convidada)*

C. Rovira

**XIII European Congress on Catalysis (EuropaCat-2017)**

Florència (Itàlia), 27-31 Agost 2017

*Activation of oxygen in the ceria lattice by incorporation of platinum in Pt/CeO<sub>2</sub> catalysts for low-temperature CO oxidation (comunicació oral)*

I. Boronin, A. I. Stadnichenko, E. M. Slavinskaya, T. Y. Kardash, V. V. Muravyov, A. Figueroba, A. Bruix, K. M. Neyman

*How nanoscale metal-oxide boundaries activate micrometer-sized metal particles for CO oxidation via a long-range effect (comunicació oral)*

Y. Suchorski, S. M. Kozlov, M. Datler, I. Bepalov, K. M. Neyman, G. Rupprechter

**68th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry**

Rhode Island (Estats Units), 27 Agost – 1 Setembre 2017

*Single-molecule electrochemically-gated field-effect transistors (comunicació oral tipus keynote)*

I. Díez-Pérez, A. C. Aragonés, N. Darwish

**33rd European Conference on Surface Science (ECOSS-33)**

Szeged (Hongria), 27 Agost – 1 Setembre 2017

*Efficient computational engineering of bimetallic nanocrystals (comunicació convidada)*

K. M. Neyman, G. Kovács, S. M. Kozlov

*Spectroscopy and microscopy of catalytic processes on well-defined surfaces: from UHV to operando conditions (comunicació convidada)*

G. Rupprechter, Y. Suchorski, S. M. Kozlov, M. Datler, I. Bepalov, K. M. Neyman

**11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2017)**

Munic (Alemanya), 27 Agost - 1 Setembre 2017

*An algorithm to locate optimal bond breaking points on potential energy surfaces for mechanochemical reactions (pòster)*

J. M. Bofill, J. Ribas-Ariño, S. P. García, W. Quapp

*Unraveling the magnetic transition temperature from changes in spin correlation (comunicació oral)*

M. Deumal

*Magnetic fingerprint of self-assembling DTA-based molecule-based magnets (comunicació oral)*

T. Francese

*Optimal Faujasite structures for post combustion CO<sub>2</sub> capture in swing adsorption processes (pòster)*

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

*Adsorption of post-combustion gases by Mg-MOF-74 (pòster)*

F. Keshavarz, O. Sánchez, D. Bahamon, P. Gamallo, X. Giménez, R. Sayós

**69th Annual Meeting of the Electrochemical Society of Electrochemistry**

Bolonya (Itàlia), 2-7 Setembre 2017

I. Díez-Pérez (*organització del symposium 16: Micro- and Nano-Scale Platforms to Study Electron Transport in Bio/Molecular Systems: from Fundamentals to Molecular Devices*)

**Modeling Interactions in Biomolecules VIII**

Pilsen (República Txeca), 3-8 Setembre 2017

*How non-terran biosolvents affect the structure and stability of B-DNA (comunicació oral)*

J. Poater, T. A. Hamlin, C. Fonseca Guerra, F. M. Bickelhaupt

**MGMS international meeting: QM/MM Methods and Applications**

Manchester (Regne Unit), 4-6 Setembre 2017

*Sugar conformational changes and catalytic mechanisms of carbohydrate-active enzymes (conferència convidada)*

C. Rovira

**11th European Conference on Theoretical and Computational Chemistry (EUCO 2017)**

Barcelona (Espanya), 4-7 Setembre 2017

M. Deumal, R. Sayós (*organització del congrés, chairmans i membres del comitè local*)

*Unraveling the magnetic transition temperature from changes in spin correlation (comunicació oral)*

M. Deumal

*Molecular dynamic simulations of oil-water wetting on mineral surfaces (comunicació oral)*

G. Alonso, P. Gamallo, C. Rincón, R. Sayós

*Ti(IV)-enolates can act as nucleophilic or birradical reagents: new reactivity induced by valence tautomerism (comunicació oral)*

I. de P. R. Moreira, C. Heras, J. M. Bofill, A. Gómez-Palomino, P. Romea, F. Urpí

*Conformationally induced paramagnetism in aryl substituted 2-imino-thiazole derivatives (pòster)*

C. Heras, R. Valero, G. Albareda, F. López-Calahorra, I. de P. R. Moreira, J. M. Bofill

**Computational Advances in Drug Discovery - SBDD2017**

Lausanne (Suïssa), 5-8 Setembre 2017

*Sugar conformational changes and catalysis of carbohydrate-active enzymes  
(conferència convidada)*

C. Rovira

**6th Workshop of the European Doctorate in Theoretical Chemistry and Computational Modelling (TCCM – 2017)**

Barcelona (Espanya), 8 Setembre 2017

*On the calculation of interfacial tension and contact angle applied to rock/oil/water  
(comunicació oral)*

G. Alonso, P. Gamallo, R. Sayós

*Effect of Si/Al ratio on post combustion CO<sub>2</sub> capture by adsorption with faujasites  
(comunicació oral)*

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

*Catalysts and catalysis through methods on models (comunicació oral)*

F. Viñes, S. T. Bromley, K. M. Neyman, F. Illas

*Models of magnesium silicate dust cores. Comparison of physical properties of different  
methods (comunicació oral)*

A. Macià

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

I. Alcón

*Highly-active Au/ $\delta$ -MoC and Au/ $\beta$ -Mo<sub>2</sub>C catalysts for the low-temperature water gas  
shift reaction (comunicació oral)*

S. Posada-Pérez, R. A. Gutiérrez, Z. Zuo, P. J. Ramírez, F. Viñes, P. Liu, F. Illas, J. A. Rodríguez

**International Workshop Advanced Materials 2017**

Pomorie (Bulgària), 10-13 Setembre 2017

*Catalysts and catalysis through methods on models (comunicació oral)*

F. Viñes, S. T. Bromley, K. M. Neyman, F. Illas

*On the accuracy of density functionals in describing transition metal surface properties  
(comunicació oral)*

L. Vega, J. Ruvireta, F. Viñes, F. Illas

*C poisoning on noble and Pt-group metals (comunicació oral)*

O. Piqué, F. Viñes

**CECAM Meeting - Big-Data driven Materials Science**

Lausanne (Suïssa), 11-13 Setembre 2017

*Learning how oxide materials evolve from nano to bulk (comunicació oral)*

S. T. Bromley

**Joint Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER 2017)**

Barcelona (Espanya), 12-14 Setembre 2017

A. Aguilar (organització del congrés, chair)

F. Huarte-Larrañaga (organització del congrés, secretari)

M. Albertí, M. González, J. M. Lucas (organització del congrés)

*What can molecular simulations do for industrial processes? (comunicació oral)*

P. Gamallo

Dynamics of the gas phase capture processes  $Rg + H_2^+ \rightarrow RgH_2^+$  (Rg: He, Ne, Ar) (pòster)

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

*Vibrational relaxation quantum dynamics of diatomic molecules inside superfluid helium nanodroplets. The case of I<sub>2</sub> (comunicació oral)*

A. Vilà, M. Paniagua, M. González

*Molecular photodissociation in superfluid helium nanodroplets. A quantum dynamics study of  $Br_2(X) + h\nu \rightarrow Br_2(B) \rightarrow Br + Br^*$  (pòster)*

A. Vilà, M. González

*Quantum-classical dynamics of the capture process of atoms by superfluid helium nanodroplets. The Ne + (<sup>4</sup>He)<sub>500</sub> system and the influence of angular momentum (pòster)*

M. Blancafort, A. Vilà, M. González

*Capture of Ne atoms by superfluid <sup>4</sup>He nanodroplets at low energy. Quantum vs classical comparison at J=0 (pòster)*

A. Sopena, A. Vilà, M. González

*Transition from small clusters to neat methanol (pòster)*

M. Albertí, A. Amat, A. Aguilar, F. Pirani

*Molecular hydrogen confined in carbon nanotubes: quantum dynamics calculations and resonance enhanced diffusion (pòster)*

M. Mondelo, F. Huarte-Larrañaga

*The role of Li<sup>+</sup> ions in gas phase 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 molecules (pòster)*

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

*Non-adiabatic processes in  $N_2O(X^1\Sigma^+) + Na^+(^1S_0)$  gas phase collisions in the few keV energy range (pòster)*

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

**8th International Conference on Theory of Atomic & Molecular Clusters (TAMMC VIII)**

Pekin (Xina), 17-22 Setembre 2017

*Properties of realistic models of semiconducting nanoparticles (conferència convidada)*

F. Illas

*In-silico engineering bimetallic nanocrystals (conferència convidada)*

K. M. Neyman

**10 th World Congress of Chemical Engineering (WCCE 2017)**

Barcelona (Espanya), 1-5 Octubre 2017

*Effect of Si/Al ratio in faujasites for post combustion CO<sub>2</sub> capture via pressure and temperature swing adsorption processes (comunicació oral)*

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

**European Symposium on Computer-Aided Process Engineering, ESCAPE-27**

Barcelona (Espanya), 1-5 Octubre 2017

*Pharmaceuticals removal from water effluents by adsorption in activated carbons using Monte Carlo simulations (comunicació oral)*

D. Bahamon, L. F. Vega

**6th Jornades sobre l'Ensenyament de la Química a Catalunya (JEQC - 2017)**

Expoquimia 2017, Barcelona (Espanya), 2-6 Octubre 2017

*El Postdoc (comunicació oral)*

F. Viñes

**6th Mini-Workshop on Statistical and Molecular Biophysics**

Trieste (Itàlia), 18-19 Octubre 2017

*Carbohydrate-active enzymes: sugar conformations and reactivity (conferència convidada)*

C. Rovira

**FEBS3 + 1st Joint Meeting of the French-Portuguese-Spanish Biochemical Molecular Biology Societies. XL SEBBM Congress**

Barcelona (Espanya), 23-26 Octubre 2017

*Metabolic characterization of castration-resistant prostate cancer (CRPC): Metabolic phenotype associated with metastatic progression (pòster)*

C. Balcells, I. Marín de Mas, M. Tarrado-Castellarnau, S. Marín, F. Mas, T. M. Thompson, M. Cascante

**American Institute of Chemical Engineers (AIChE) 2017 Annual Meeting**

Minneapolis (Estats Units), 29 Octubre – 3 Novembre 2017

*Understanding the removal of pharmaceuticals from water effluents by adsorption in activated carbons – a molecular simulation approach (comunicació oral)*

L. F. Vega, D. Bahamon.

**3rd International Conference “Electronic Structure Theory for Accelerated Materials Design: New Tool for Materials Science”**

Moscú (Rússia), 30-31 Octubre 2017

*Computational engineering of bimetallic nanocrystals (comunicació oral tipus keynote)*

K. M. Neyman

**Theory seminars of the Institute for Solid State Physics of the University of Tokyo**

Chiba (Japó), 31 Octubre 2017

*Spin transitions in spiro-biphenalenyl-based radicals: identification of the driving forces and the origin of bistability (comunicació oral)*

J. Ribas-Ariño

**EMN Meeting on Computation and Theory**

Dubai (Emirats Àrabs Units), 6-10 Novembre 2017

*Bridge between the aromaticity of polycyclic aromatic hydrocarbons and closo borohydrides (comunicació oral)*

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

**International Conference on NANO- AND FUNCTIONAL MATERIALS: Interface between Science & Engineering (NFM-2017)**

Rajasthan (Índia), 16-18 Novembre 2017

*Molecular modeling of organometallic Ir(III) compounds relevant for optoelectronic applications (conferència convidada)*

P. Alemany

**Symposium on the occasion of Paul Bagus' 80th Birthday**

Berlin (Alemanya), 19 Novembre 2017

*Core level binding energies, Paul and me: a trip from HF and beyond to DFT and GW based methods (conferència convidada)*

F. Illas

**19th International Workshop on Nanoscience & Nanotechnology**

Sofia (Bulgària), 24-25 Novembre 2017

*Ionization and conformational equilibria of citric acid: delocalized proton binding in solution (comunicació oral)*

M. Nedyalkova, S. Madurga, F. Mas, J. L. Garcés



*A Model provides insight into electric field-induced rupture mechanism of water-in-toluene emulsion films (comunicació oral)*

M. Nedyalkova, D. Diminova, S. Pisov, N. Panchev, S. Madurga, A. Proykova

*The Boron oxide glasses and nanocomposites: synthetic, structural and statistical approach (comunicació oral)*

H. Hristov, M. Nedyalkova, S. Madurga, V. Simeonov

### **18th European Meeting on Environmental Chemistry**

Porto (Portugal), 26-29 Novembre 2017

*Computational & cheminformatics approach to characterization of green solvents (pòster)*

M. Nedyalkova, M. Tobiszewski, S. Madurga, F. Pena-Pereira, V. Simeonov, J. Namiesnik

### **Computational Modeling of Materials School**

Sofia (Bulgària), 4-5 Decembre 2017

*Learning how oxide materials evolve from nano to bulk (comunicació oral)*

S. T. Bromley

*Modeling spin-crossover in condensed phase from molècules to metal-organic-frameworks (comunicació oral)*

J. Cirera

*Noncovalent interactions: a useful tool for crystal and materials design (comunicació oral)*

J. Echeverría

*Molecular dynamics simulations applied to industrial processes (comunicació oral)*

P. Gamallo

*Efficient transport and magnetoresistance effect in single-molecule devices (comunicació oral)*

E. Ruiz

### **2nd International Caparica Christmas Congress on Translational Chemistry**

Lisboa (Portugal), 4-7 Decembre 2017

*Aromaticity of closo boron hydride clusters is driven by Hückel's rule (comunicació oral)*

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

### **Chemistry as Innovating Science (CHAINS 2017)**

Veldhoven (Països Baixos), 5-7 Decembre 2017

*Magnetic fingerprint of self-assembling DTA-based molecular magnets (comunicació oral)*

T. Francese

**UK Catalysis Hub Winter Conference 2017**

Oxfordshire (Regne Unit), 14-15 Decembre 2017

*Transition metal carbides based catalysts for clean energy (conferència convidada)*

F. Illas

## ESTADES EN CENTRES EXTERNS

---

- Albertí, M.      **Univeristà di Perugia, Perugia (Itàlia)**  
Estada de recerca. Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie.  
Febrer-Juliol 2017
- Alemaný, P.      **Departamento de Química, Universidad Católica del Norte, Antofagasta (Xile)**  
Investigador visitant UB convidat per J. Llanos. Octubre 2017
- Díez-Pérez, I.      **Department of Chemistry, Kings College London, London (Regne Unit)**  
Investigador visitant UB. Octubre-Decembre 2017
- López, M.      **Laboratoire d'Electrochimie Moléculaire, UMR CNRS, Université Paris 7, Paris, (França)**  
Estada predoctoral de recerca. Març-Maig 2017
- Mondelo, M.      **Fakultät für Chemie, Universität Bielefeld, Bielefeld (Alemanya)**  
Estada predoctoral de recerca amb el Prof. U. Manthe. Febrer-Març 2017
- Neyman, K. M.      **Uppsala University, Uppsala (Suècia)**  
Investigador visitant convidat. Gener-Febrer 2017
- Neyman, K. M.      **Chalmers University of Technology, Gotemburg (Suècia)**  
Investigador visitant convidat. Maig-Juny 2017
- Posada, S.      **Cardiff University, Cardiff (Regne Unit)**  
Estada predoctoral de recerca. Maig-Juliol 2017
- Prats, H.      **Technische Universität München, Munic (Alemanya)**  
Estada predoctoral de recerca amb Karsten Reuter. Setembre-Decembre 2017
- Ribas, J.      **University of Wroclaw, Wroclaw (Polònia)**  
Investigador visitant UB amb Przemyslaw Dopieralski. Juliol 2017
- Ribas, J.      **Center for Computational Science and E-Systems, Japan Atomic Energy Agency, Chiba (Japó)**  
Investigador visitant UB amb Motoyuki Shiga. Octubre-Novembre 2017

## PARTICIPACIÓ EN PROJECTES D'INVESTIGACIÓ

---

*Force Fields in Electrostatic Catalysis*

Ismael Díez-Pérez

Universitat de Barcelona

**ERC**, 2017-2022

European Research Council

*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 Bioquímica Integrativa*

Marta Cascante Serratosa, Universitat de Barcelona

**2014SGR1017**, 2014-2017

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

*Simulació molecular aplicada (MOLSIMAP)*

Fèlix Lluís Llovell Ferret, IQS, Universitat Ramon Llull

**2014SGR1582**, 2014-2017

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)

*Premi a l'Excel·lència Investigadora*

Eliseo Ruiz, Universitat de Barcelona

2017

Real Sociedad Española de Química

*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)

*Reactivity of lattice oxygen in nanostructured CeO<sub>2</sub> doped by Pt and Pd*

Konstantin Neyman, Universitat de Barcelona

**QCM-2017-2-0024**, 2017-2018

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)

*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 (MINECO)

*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**, 2016-2018

Ministerio de Economia y Competitividad (MINECO), Unió Europea

*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 (prorrogado)

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**, 2015-2018

Ministerio de Economía 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 Economía 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)

*Fenòmens de no-equilibri en matèria tova: de fluids complexos a teixits cel·lulars*

Francesc Sagués Mestre, Universitat de Barcelona

**FIS2016-78507-C2-1-P**, 2017-2019

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Instituto Nacional de Bioinformática*

Marta Cascante Serratosa, Universitat de Barcelona

**Ayudas para proyectos de investigación del área de Ciencias de la Salud (FIS)**, 2018-2020

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**, 2014-2017

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

*Value added products for cosmetic from soybean by-product. Project DIOR-Barcelona*

Francesc Mas Pujadas, Universitat de Barcelona

Contracte amb empresa multinacional BUNGE IBÉRICA SAU, 2017-2018

*Estudi de laboratori i planta pilot per la recuperació d'amoní dels purins*

Francesc Mas Pujadas, Universitat de Barcelona

Contracte amb empresa multinacional INDUKERN (divisió veterinària), 2017-2019

*EXCIPHOCAT: - Tailoring the TiO<sub>2</sub> excited states by nanostructuring and hydroxylation: A step forward understanding photocatalytic water splitting*

Francesc Illas Riera

Universitat de Barcelona

**PRACE - 2016163940**, 2017-2018

Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE)

*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)

*Theoretical Chemistry and Computational Modelling*

Juan Novoa Vide, Universitat de Barcelona

**H2020-MSCA-ITN-2014-642294**

H2020, Innovative Training Networks

*Patient Miner*

José Roca Torrent

**H2020-EIT. European Institute of Innovation and Technology**, 2016-2017

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

*Theoretical Chemistry and Computational Modelling*

J. J. Novoa, Universidad Autonoma de Madrid

**TCCM-642294**, 2015-2018

Unió Europea (Marie Skłodowska-Curie Innovative Training Networks)

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

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 Sklodowska-Curie Actions, 2015-2018.**

Unió Europea.

*Deciphering the Metabolism of Haematological Cancers (HaemMetabolome)*

Marta Cascante Serratosa

**8P1MCA - H2020. PILLAR 1-EXCELLENT SCIENCE. MCA. Marie Sklodowska-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)

Addressing CI&TD problems, decreasing drop-out and improving Student outcomes, using active learning methodologies

Joao Luis Monney de Sá Paiva (coordinador Universitat de Viseu), Xavier Giménez (coordinador UB)

Projecte d'Innovació Docent (Universitat de Viseu, Portugal)

*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

*Molecularly Assembled Electrodes.*

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

**Fondecyt, 2013-2017**

FONDECYT

*Materiales nanoestructurados en catálisis: Análisis experimental de hallazgos obtenidos mediante modelización computacional*

Konstantin Neyman, Universitat of Barcelona

Universitat de Barcelona

**PRX17/00348, 2018**

Ministerio de Educación, Cultura y Deporte (MECD)





**Institut de Química Teòrica  
i Computacional**