

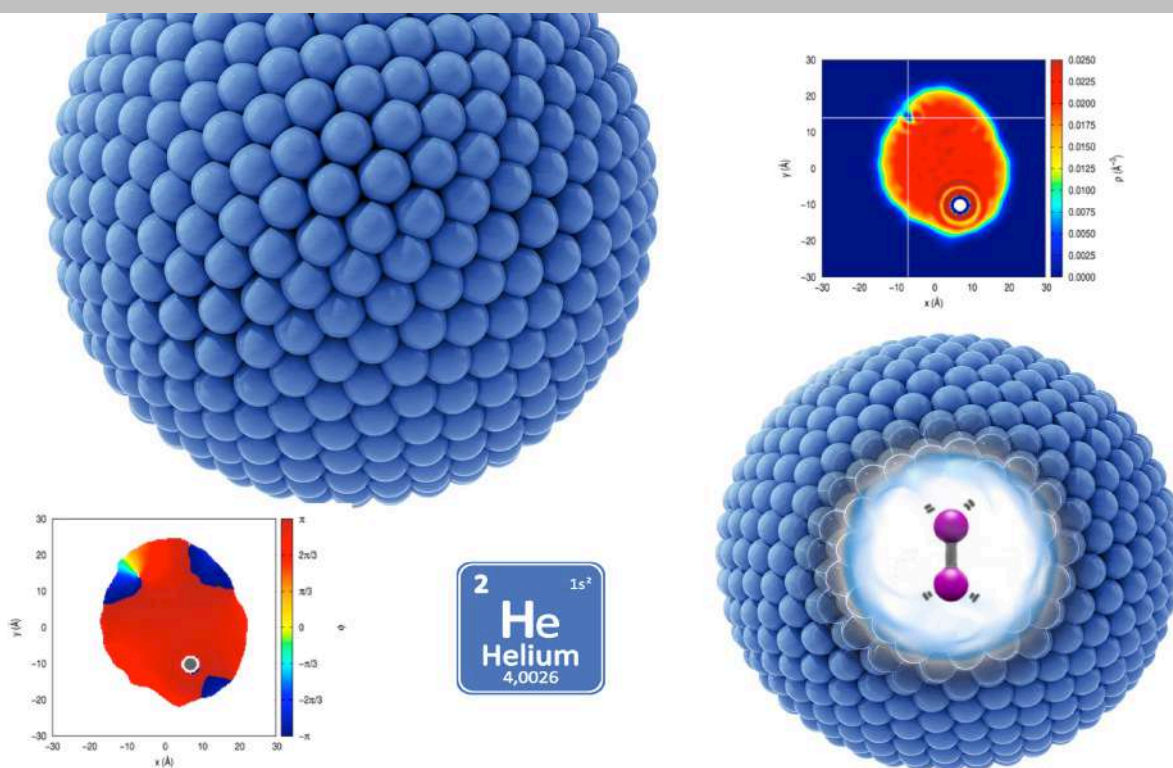


Institut de Química Teòrica  
i Computacional  
UNIVERSITAT DE BARCELONA



UNIVERSITAT DE  
BARCELONA

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



Memòria d'activitats 2018





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 l'abril de 2018 tinc l'honor de ser-ne el Director. Vull aprofitar aquesta oportunitat d'encapçalar la memòria anual de l'IQTCUB per agrair explícitament als Drs. Francesc Illas, Ramón Sayós i Carme Rovira per haver participat a l' anterior equip de direcció de l'IQTCUB i també al Dr. Jordi Poater per incorporar-se al costat del Prof. Francesc Illas en el nou equip de direcció de l'Institut. Aquest 2018 ha estat important a causa de la

incorporació de nous grups de la Facultat de Farmàcia (Drs. Carles Curuchet i Javier Luque). Així mateix, des del punt de vista de reconeixement extern la concessió de l'ajut de María de Maeztu ha de suposar un salt tant en la qualitat com en la quantitat de la investigació realitzada en el nostre Institut. Aquest fet hauria també de produir una incorporació de nous membres a l'Institut que aportin tant un augment de la qualitat de la nostra investigació com una diversificació en els temes dels nostres projectes de recerca.

L'objectiu comú dels projectes de recerca duts a terme a l'Institut és l'ús de mètodes arrelats a la química quàntica, recentment també està obert a grups experimentals dels nostres departaments amb estretes col·laboracions amb grups de recerca centrats en Química Computacional. Això ha de fomentar i augmentar el caràcter multidisciplinari de la nostra recerca. Tradicionalment, la recerca de l'IQTCUB es distingeix del que hom espera d'un químic tradicional, ja que el instruments emprats pels nostres investigadors no es troben en un laboratori típic sinó potser en un "laboratori" de càlcul que sovint només és el punt d'entrada als nostres recursos computacionals o a centres de supercomputació amb capacitat de càlcul encara més gran.

L'objectiu principal de la Química Teòrica i Computacional és aconseguir una comprensió detallada dels processos químics i físics per ajudar a interpretar els resultats experimentals i fer prediccions que condueixin a nous experiments. En fer-ho, aquesta disciplina pot aportar nous conceptes que permetin avançar en el disseny racional de nous materials amb propietats físiques i la seva aplicació en dispositius electrònics i magnètics, al descobriment de nous fàrmacs i a comprendre processos bioquímics, a noves reaccions que proporcionen una millora dels processos químics per fer-los més eficaços i més respectuosos amb el medi ambient i proposar noves fonts d'energia sostenibles, per afrontar els reptes que actualment té la nostra societat. A més, hem d'integrar en la nostra recerca noves eines com l'aprenentatge automàtic (intel·ligència artificial), la realitat virtual i nous recursos informàtics (computació "exascale" i quàntica).

Eliseo Ruiz  
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	10
I.5 Equipaments	11
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	33
II.3 Investigadors convidats per l'IQTCUB	34
III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB.....	37
III.1 Resultats més rellevants	37
III.2 Llista de publicacions	58
Articles publicats	58
Capítols de llibres i proceedings	73
III.3 Altres activitats	75
Tesis doctorals	75
Màsters	76
Participació a congressos	79
Estades en centres externs	98
Participació en projectes d'investigació	100



## 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

Durant aquest 2018 la direcció de l'IQTCUB ha canviat. A continuació, detallem l'equip directiu sortint,

<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 l'equip directiu entrant,

<b>Prof. Eliseo Ruiz Sabin</b>	<i>Director</i>
<b>Prof. Jordi Poater Teixidor</b>	<i>Secretari</i>
<b>Prof. Iberio de P. Ribeiro Moreira</b>	<i>Tresorer</i>
<b>Prof. Francesc Illas Riera</b>	<i>Vocal</i>

## I.2 LÍNIES DE RECERCA DEL IQTCUB

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

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

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

### **2. Ciència dels materials computacional**

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

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

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

### **4. Reactivitat i dinàmica de reaccions**

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



### I.3 MEMBRES DE L'IQTCUB

L'IQTCUB està constituït per un total de 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.

Cognoms	Nom	Departament/Unitat	Secció
---------	-----	--------------------	--------

#### Catedràtics

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
Luque Garriga	Francisco J.	Nutrició, C. Alimentació i Gastronomo.	Ciències Bàsiques
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

Costa Sala	Ramón	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
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
Curutchet Barat	Carles E.	Farmàcia i Tecnologia Farma. i Físicoqui.	Físicoquímica
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**

Bahamón	Daniel	Química Analítica i Enginyeria Química	Enginyeria Química
Bidon-Chanal Badia	Axel	Nutrició, C. Alimentació i Gastronomo.	Ciències Bàsiques
Cirera Fernández	Jordi	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Corbella Morató	Marina	Farmàcia i Tecnologia Farma. i Físicoqui.	Físicoquímica
Jover Modrego	Jesús	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
López Marne	Estefanía	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Piqué Caufapé	Oriol	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Prats García	Hèctor	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
Estellas Martín	Carolina	Nutrició, C. Alimentació i Gastronomo.	Ciències Bàsiques
Ginex	Tiziana	Nutrició, C. Alimentació i Gastronomo.	Ciències Bàsiques
Kshatresh Dutta	Dubey	Química Inorgànica i Orgànica	Química Orgànica
Valero Montero	Rosendo	Ciència de Materials i Química Física	Química Física

*Altres*

Cortijos Aragonès	Albert	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
De Souza Pinheiro	Silvana	Farmàcia i Tecnologia Farma. i Físicoqui.	Físicoquímica
Vega Pallauta	Mauricio	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica
Vilà Casanova	Arnau	Ciència de Materials i Química Física	Química Física

**Investigadors Predoctorals***Beca FI*

Aledavood	Elnaz	Nutrició, C. Alimentació i Gastronomia.	Ciències Bàsiques
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
Vega Domínguez	Lorena	Ciència de Materials i Química Física	Química Física

*Beca FPI*

Bernuz Fitó	Efrem	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	Sergi	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
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
Svobodova	Adela	Ciència de Materials i Química Física	Ciència de Materials
Velásquez Benites	Juan Diego	Química Inorgànica i Orgànica	Química Inorgànica

*Beca CONICYT*

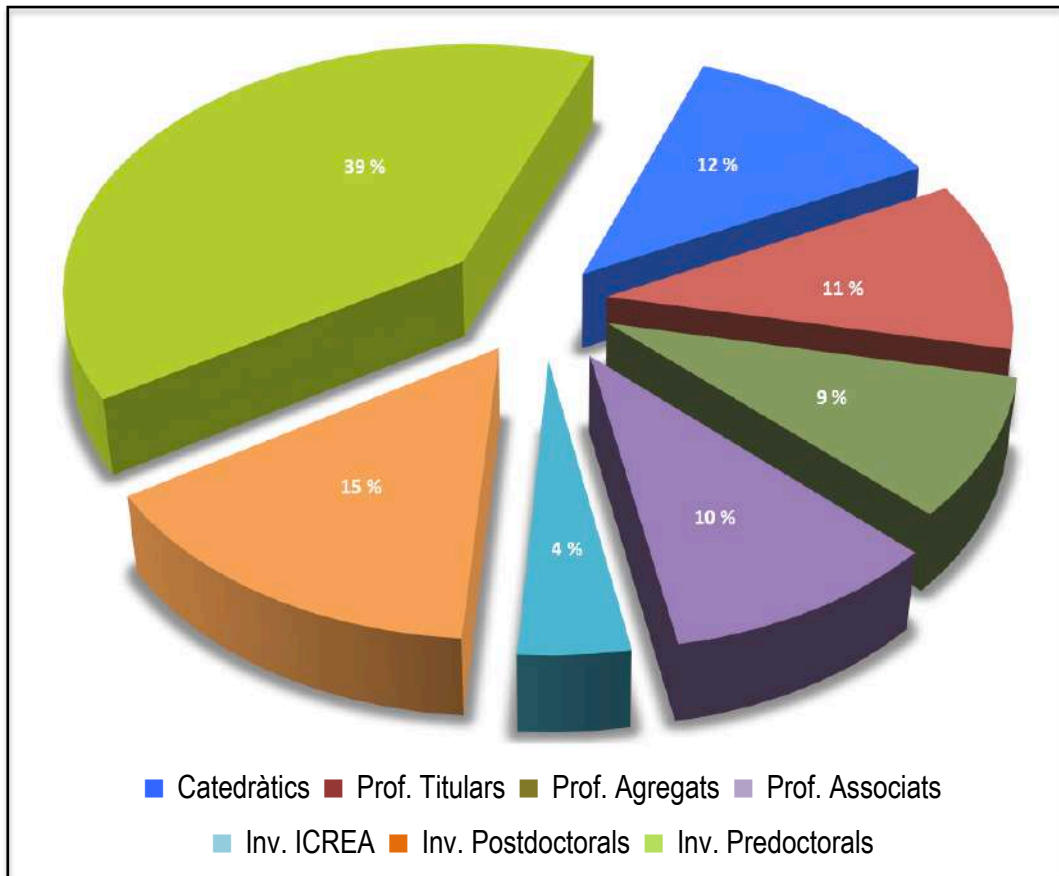
Zamora	William J.	Nutrició, C. Alimentació i Gastronomia.	Ciències Bàsiques
--------	------------	---	-------------------

*Beca Doctorat Industrial*

Vázquez López	Javier	Nutrició, C. Alimentació i Gastronomia.	Ciències Bàsiques
---------------	--------	---	-------------------

*Altres*

Costas Viñas	Pol	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
De Moya	Natalia	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Figueras Valls	Marc	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Jurado Mañas	Anabel	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Kamalinahad	Saedeh	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Kassiani	Motaki	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
Morales Salvador	Raúl	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Privat Contreras	Cristian	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Raich Armendáriz	Lluís	Química Inorgànica i Orgànica	Química Orgànica
Santiago Piera	Raúl	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Seira	Constantí	Nutrició, C. Alimentació i Gastronomia.	Ciències Bàsiques
Viayna	Antonio	Nutrició, C. Alimentació i Gastronomia.	Ciències Bàsiques
Vila Julià	Guillem	Ciència de Materials i Química Física	Química Física
Vílchez	David	Nutrició, C. Alimentació i Gastronomia.	Ciències Bàsiques



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 Swtich 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 2018.

- 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 Anabel Jurado Mañas i Raúl Morales Salvador per iniciar el màster sota la direcció del Dr. Francesc Viñes, i a Beatriz Piniello Castillo per iniciar-lo sota la direcció de la Dra. Carme Rovira.

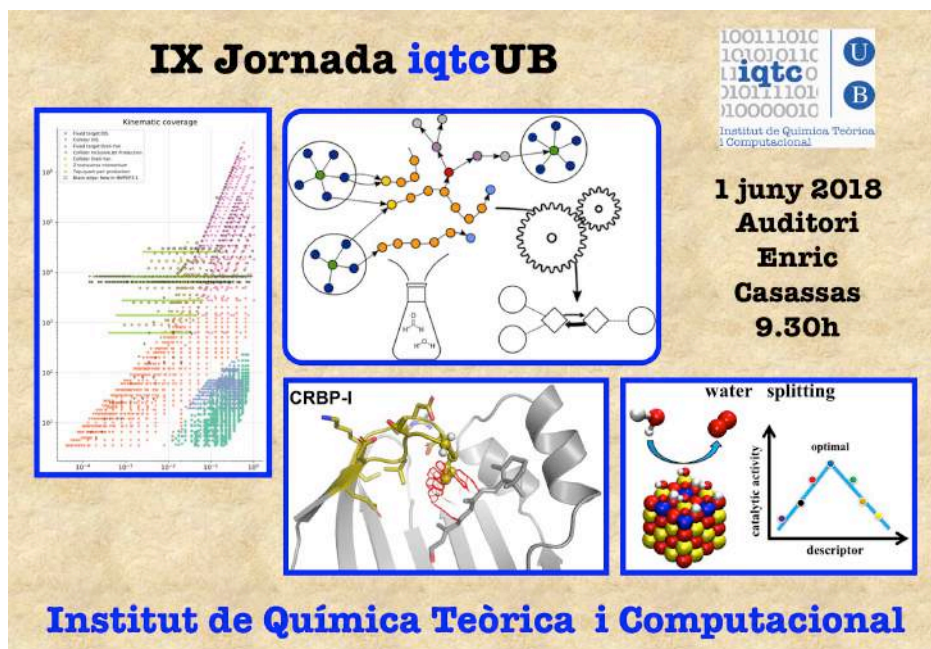
*Despesa associada: 6.246 €*



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

- b. **9<sup>a</sup> Jornada de l'IQTCUB.** El dia 1 de Juny de 2018 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 del Prof. Dr. Markus Reiher del ETH de Zurich amb la conferència titulada *Automated and Interactive Exploration of Complex Reaction Mechanism*, i del Prof. Dr. José Ignacio Latorre del Institut de Ciències del Cosmos de la UB amb la conferència titulada *Quantum Disruption*. A més a més, van participar la Dra. Carol Estarellas (*Self-Controlled Ligand Release Mechanism as Determinant of the Selective Retinol Binding to Celular Carriers*), el Dr. Federico Calle-Vallejo (*Computational Design of New Materials for Water Electrolyzers*) i en Martín Amoza Dávila (*Understanding the Origin of Magnetic Anisotropy in S=1/2 Mononuclear Transition Metal Complexes*) tots tres de la Universitat de Barcelona i de l'IQTCUB. A més a més es presentaren 14 contribucions en format pòster. Les despeses totals de la Jornada es corresponen al cost del transport i l'estada del Prof. Dr. Markus Reiher i del servei de càtering ofert a tots assistents.

Despesa pressupostada: 1.728 €



The poster for the IX Jornada iqtcUB features a central title and several scientific illustrations. On the left, a 'Kinematic coverage' plot shows a log-log scale of values. The top center shows a molecular reaction network with a flask and gears. The bottom left displays a protein structure labeled 'CRBP-I'. The bottom right shows a 'water splitting' diagram with a graph of 'catalytic activity' vs 'descriptor' and a molecular model. The top right includes the iqtcUB logo and the event details: '1 juny 2018 Auditori Enric Casassas 9.30h'. The bottom of the poster reads 'Institut de Química Teòrica i Computacional'.

Anunci de la 9<sup>a</sup> Jornada de l'IQTCUB.

c. **8<sup>e</sup> Curs d'Introducció a la Química Computacional.** L'objectiu principal del curs organitzat pel Prof. Gabriel Aullón del Departament de Química Inorgànica i Orgànica i membre 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, Enginyeria Química i d'Enginyeria de Materials de la Universitat de Barcelona. Els diferents temes s'han cobert per docents vinculats a l' IQTCUB en sessions de dues hores que en aquest 2018 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 25 al 29 de Juny de 2018, han participat 10 alumnes.

*Despesa pressupostada: 250 €*

d. **7<sup>e</sup> Curs Avançat de Química Computacional.** Donat l'èxit de les edicions anteriors d'aquest curs i la gran satisfacció mostrada pels alumnes participants, aquest any l'Institut ha endegat la 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 25 al 29 de Juny 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 7: O. Piqué, M. López, A. Palacios, L. Vega, A. Cardenal, G. Murrià i C. Outeda. 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. *Introducció SGE*, Gerard Alonso (UB, IQTCUB).
2. *Estats excitats*, Prof. Mercè Deumal (UB, IQTCUB).
3. *Reaccions en fase gas: dinàmica i cinètica*, Profs. Miguel Gonzalez i Pablo Gamallo (UB, IQTCUB).
4. *Simulacions de Monte Carlo Cinètic en catàlisi heterogènia*, Prof. Ramon Sayós i Hèctor Prats (UB, IQTCUB).
5. *Estat sòlid*, Profs. Iberio Ribeiro (UB, IQTCUB).
6. *Fortran 90*, Prof. Miquel Llunell (UB, IQTCUB).
7. *Disseny de fàrmacs*, Prof. Jaime Rubio (UB, IQTCUB).
8. *Modelització multiescala de dissolucions i biomolècules*, Prof. Carles Curutxet (UB, IQTCUB).



Institut de Química Teòrica  
i Computacional de la UB



U  
B

## VII CURS AVANÇAT DE QUÍMICA COMPUTACIONAL



- 25 al 29 de juny 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 7<sup>e</sup> Curs Avançat de Química Computacional celebrat enguany.



Fotografies amb els alumnes que han realitzat el Curs Avançat de Química Computacional d'enguany.

e. **Seminaris interns de l'IQTC.** En aquest 2018 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 Efrem Bernuz i Antoni Macià vinculats tant a l'IQTCUB com al Departament de Ciència de Materials i Química Física de la Universitat de Barcelona. Els seminaris que s'han impartit en el transcurs de l'any 2018 són els següents:

1. *Ab initio study in low spin magnetic complexes: candidates for qubits.*  
Martín Amoza, 19 gener 2018.
2. *Useful tools for computational chemistry.*  
Héctor Prats, 19 gener 2018.
3. *A simple approach to connect experimental and computational electrocatalysis.*  
Dr. Federico Calle-Vallejo, 21 març 2018.
4. *Post-PhD project application.*  
Dr. Isaac Alcón, 10 maig 2018.
5. *Coupling conformational and ionization equilibria to model polyelectrolyte stretching.*  
Pablo Blanco Andrés, 14 juny 2018.
6. *Single-molecule electronic transport properties: magnetoresistance and switching behaviour.*  
Alejandro Martín Rodríguez, 14 juny 2018.
7. *Modelling metal/metal-oxide interface effects in nanocomposite materials for catalysis and beyond.*  
Prof. Konstantin Neyman, 18 setembre 2018.
8. *Charge transport in bisdithiazolyl-based compounds.*  
Cristina Rocero, 16 octubre 2018.
9. *Disseny i síntesi de compostos orgànics amb potencial activitat antitumoral per inhibició enzimàtica.*  
Marta Vilaplana, 6 novembre 2018.
10. *Production and uses of hydrogen.*  
Juan José Piñero, 6 novembre 2018.
11. *On the description of transition metal systems by density functionals.*  
Lorena Vega, 11 desembre 2018.
12. *Tuning activity of transition metal carbides by surface metal alloying: case of study of CO<sub>2</sub> capture.* Martí López, 11 desembre 2018.



f. **Activitats de divulgació científica.** El Prof. Xavier Giménez Font ha realitzat la següent sèrie de xerrades de divulgació científica durant aquest any 2018:

1. “UB s’Apropa 18”.

Gresol Internacional American School, Terrassa, 1 gener 2018.

INS Pius Font i Quer, Manresa, 10 gener 2018.

INS Celestí Bellera, Granollers, 11 gener 2018.

INS Miramar, Viladecans, 12 gener 2018.

INS Celestí Bellera, Granollers, 12 gener 2018.

INS Montserrat Miró i Vilà, Sta. Coloma Gramanet, 15 gener 2018.

INS Domènec Perramon, Arenys de Munt, 16 gener 2018.

INS La Vall del Tenes, Sta. Eulàlia de Ronsana, 16 gener 2018.

INS Pau Vila, Sabadell, 17 gener 2018.

INS Baix a Mar, Vilanova i la Geltrú, 22 gener 2018.

INS Domènec i Montaner, Canet de Mar, 24 gener 2018.

INS Celestí Bellera, Granollers, 25 gener 2018.

Escola Pia, Caldes de Montbui, 25 gener 2018.

Escola Pia, Granollers, 25 gener 2018.

Escola La Presentació, Arenys de Mar, 30 gener 2018.

Escola Goar, Viladecans, 31 gener 2018.

INS Torre de Malla, Parets del Vallès, 31 gener 2018.

INS Les Termes, Sabadell, 1 febrer 2018.

INS Vilamajor, Sant Pere de Vilamajor, 1 febrer 2018.

INS Cal Gravat, Manresa, 2 febrer 2018.

Escola Andorrana de Batxillerat, La Margineda, Andorra, 8 febrer 2018.

INS Sentmenat, Sentmenat, 14 febrer 2018.

INS Vinyet, Sitges, 15 febrer 2018.

INS Alba del Vallès, Sant Fost de Campsentelles, 27 febrer 2018.

INS Guillem Catà, Manresa, 15 març 2018.

INS Vescomtat Cabrera, Hostalric, 16 març 2018.

INS Lliçà d’Amunt, Lliçà d’Amunt, 20 març 2018.

INS Maria de Bell-Lloc, Bigues i Riells, 17 abril 2018.

Escola Pia Igualada, Igualada, 19 abril 2018.

2. Curs “*L’Aire que respirem, l’energi que ens mou*”  
Universitat Popular, Caldes de Montbui, 10 gener 2018.  
Universitat Popular, Caldes de Montbui, 24 gener 2018.  
Universitat Popular, Caldes de Montbui, 31 gener 2018.  
Universitat Popular, Caldes de Montbui, 7 febrer 2018.  
Universitat Popular, Caldes de Montbui, 14 febrer 2018.  
Universitat Popular, Caldes de Montbui, 21 febrer 2018.  
Universitat Popular, Caldes de Montbui, 28 febrer 2018.  
Universitat Popular, Caldes de Montbui, 10 març 2018.
3. “*La màgia de l’aigua*”. **Toc–Toc UB Science Dissemination Program.**  
Escola Patroncat Domènech, Barcelona, 13 març 2018.  
Biblioteca Sagrada Família, Barcelona, 9 maig 2018.  
Escola Patroncat Domènech, Barcelona, 24 octubre 2018.  
Institut Maria Espinalt, Barcelona, 26 novembre 2018.  
INS Escola del Treball, Barcelona, 26 novembre 2018.
4. “*Les microones i les ones de ràdio. Qué són i com ens afecten*”. **Toc–Toc UB Science Dissemination Program.**  
Biblioteca Can Casas, Llinars del Vallès, 8 novembre 2018.  
Institut Frederic Mompou, Sant Vicenç dels Horts, 14 novembre 2018.
5. “*La màgia de l’aigua*”. **La Setmana de la Ciència.**  
Sala d’Actes UPC, Vilanova i la Geltrú, 13 novembre 2018.  
La Salle Bonanova, Barcelona, 15 novembre 2018.
6. “*La màgia de l’aigua*”. **Magnet Program, Bofill Foundation.**  
INS La Ribera, Montcada i Reixach, 14 desembre 2018.
7. “*Podem entendre la Física Quàntica?*” **Conferència en ocasió de l’any Feynman, Programa Visions de Ciència.**  
Biblioteca Sagrada Família, Barcelona, 22 gener 2018.
8. “*Apropa’t a la UB!*”  
Visita de l’Escola Lleó XIII. Universitat de Barcelona, 20 abril 2018.
9. “*Feynman i les màquines moleculars: el somni d’un visionari*” **NanoEduca 2018.**  
Universitat de Barcelona, Barcelona, 9 maig 2018.

10. *"Poca broma amb la Física Quàntica i Richard Feynman: les contribucions d'un geni"* **Sèrie de conferències i la Setmana de la Ciència 2018.**  
Agrupació Astronòmica de Sabadell, Sabadell, 14 novembre 2018.
11. *"Llibres de divulgació científica"* **Màster de Comunicació Científica.**  
Universitat de Barcelona, Barcelona, 5 novembre 2018.

A més a més, el Prof. Giménez ha realitzat entrevistes a mitjans de comunicació. Tot seguit recollim tot aquest material i d'altre que es pot accedir via web:

1. *"Geoingenieritza, mitoetatik harago"* entrevistat per Juanma Gallego.  
Diari Berria, 28 gener 2018.  
[http://www.berria.eus/paperekoa/1974/018/001/2018-01-28/geoingenieritza\\_mitoetatik\\_harago.htm](http://www.berria.eus/paperekoa/1974/018/001/2018-01-28/geoingenieritza_mitoetatik_harago.htm)
2. *"Europa obligarà a passar a tots els vehicles matriculats uns tests més exhaustius"*. Entrevista al programa "Via Lliure", RAC1, 1 setembre 2018.  
<https://www.rac1.cat/programes/via-lliure/20180901/451552580540/europa-obligara-a-tots-els-vehicles-matriculats-a-passar-uns-tests-mes-exhaustius.html>
3. *"La màgia de l'aigua"*, Toc-Toc UB Programa de disseminació científica, E. Patronat Domènech, Barcelona. 24 octubre 2018.  
<https://sites.google.com/patronatdomenech.cat/la-mgia-de-laigua/inici>
4. *"La màgia de l'aigua"*, Setmana de la Ciència 2018.  
INS Les Vinyes, Cubelles, 15 novembre 2018.  
<https://agora.xtec.cat/inslesvinyescubelles/general/la-magia-de-laigua/>

Per altra banda, a continuació fem un recull d'altres activitats de divulgació realitzades per altres membres de l'IQTC en aquest any 2018:

1. *"Escalfament global i canvi climàtic"*.  
Francesc Viñes, Escola Can Fabra, 13 juny 2018.

2. "Fem Química al Laboratori"

Antonio Aguilar, Jordi Ignés, Carme Sousa i Pablo Gamallo, gener-febrer 2018.

3. "IV Festa de la Ciència de la UB"

Pablo Gamallo, Universitat de Barcelona, 11 maig 2018.



Anunci de la 4ª Festa de Ciència de la UB

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

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

1. **Dr. Mark Koper** (Leiden University), Leiden, Països Baixos.  
*Electrochemistry of Platinum: experiment and theory*  
4 juny 2018.
2. **Dr. Sergey Kozlov** (KAUST) Arabia Saudi.  
*Tools to analyse calculated activity of homogeneous and heterogeneous catalysts*  
15 juny 2018.
3. **Dr. Kai S. Exner** (University of Sofia), Sofia, Bulgària.  
*Identifying and closing apparent community gaps in (electro-)chemistry*  
7 novembre 2018.
4. **Dr. Albert Bruix** (Technical University of Munich), Múnic, Alemanya.  
*Taming the complexity of solid catalysts with the modern modelling toolbox*  
19 desembre 2018.
5. **Dr. Claudio Nambuena** (Universidad Tecnológica Nacional-CONICET), Argentina.  
*On the reason for  $\alpha$ -Lactalbumin adsorption on a charged surface: a study by Monte Carlo simulation*  
12 setembre 2018.
6. **Prof. Vasil Simeonov** (Universitat de Sofia), Sofia, Bulgària.  
*The Philosophy of Fake Science*  
29 octubre 2018.
7. **Prof. Andrey Chuvilin** (CIC nanoGUNE), Donostia, Espanya.  
*Electron microscopy lab at CIC nanoGUNE: a guided tour*  
22 juny 2018.

## II.3 INVESTIGADORS CONVIDATS PER L'IQTCUB

Durant el 2018, l'IQTCUB ha acollit un total de set visites temporals d'investigadors externs.

1. **Saede Kamalinahad** (visitant convidat).  
Department of Chemistry, Arak University, Arak, Iran.  
Agost 2017 - febrer 2018.
2. **Tomas Lazaukas** (visitant HPC Europa).  
University College London (UCL), Londres, Regne Unit.  
Gener 2018.
3. **Prof. Iskra Koleva** (visitant convidat).  
Universitat de Sofia, Sofia, Bulgària.  
Gener-febrer, juliol-agost 2018.
4. **Prof. Hristiyan Aleksandrov** (visitant convidat).  
Universitat de Sofia, Sofia, Bulgària.  
Gener-febrer, juliol-agost 2018.
5. **Prof. Nick Brooks** (visitant convidat).  
Imperial College London (UCL), Londres, Regne Unit.  
Febrer 2018.
6. **Prof. Sofia Olobardi** (visitant convidat).  
Universitat de Trieste, Trieste, Itàlia.  
Març-maig 2018.
7. **Prof. Galya Madjarova** (visitant convidat).  
Universitat de Sofia, Sofia, Bulgària.  
Abril 2018.

8. **Prof. Petko Petkov** (visitant convidat).  
Universitat de Sofia, Sofia, Bulgària.  
Maig 2018.
9. **Dra. Silvia Acosta** (visitant convidat).  
Universitat de Cagliari, Cagliari, Itàlia.  
Juny-juliol 2018.
10. **Prof. Jasmina Petrova** (visitant convidat).  
Universitat de Sofia, Sofia, Bulgària.  
Juliol 2018.
11. **Dr. Marco Lattuada** (visitant convidat).  
University of Fribourg, Friburg, Suïssa.  
Juliol 2018.
12. **Dr. Miroslava Nedyalkova** (Materials Networking European Project).  
Universitat de Sofia, Sofia, Bulgària.  
Juliol-agost, octubre-novembre 2018.
13. **Prof. Vasil Simeonov** (Materials Networking European Project).  
Universitat de Sofia, Sofia, Bulgària.  
Juliol, octubre-novembre 2018.
14. **Dr. Claudio Nambuena** (visitant convidat).  
Universidad Tecnologica Nacional-CONICET, Argentina.  
Setembre 2018.
15. **Myriam Torres Rico** (visitant convidat).  
Universitat de Sevilla, Sevilla, Espanya.  
Octubre-Desembre 2018.

16. **Dr. Kai S. Exner** (visitant convidat).

Universitat de Sofia, Sofia, Bulgària.

Novembre 2018.

17. **Prof. Jorge Pavez** (visitant convidat).

Universitat de Santiago de Xile, Santiago, Xile.

Novembre 2018.

18. **Dr. Motoyuki Shiga** (visitant convidat).

Japan Atomic Energy Agency, Japó.

Novembre 2018.



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

### III.1 RESULTATS MÉS RELLEVANTS

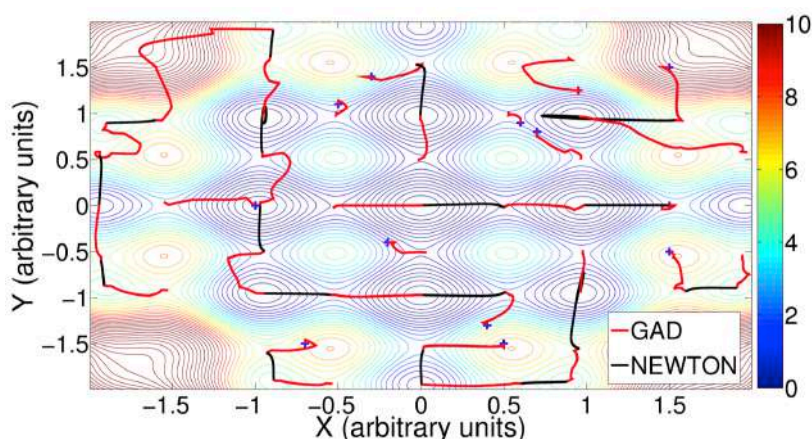
En aquesta secció es descriuen alguns dels resultats més rellevants obtinguts per cada línia de recerca de l'IQTCUB.

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

**Exploring potential energy surfaces with gentlest ascent dynamics in combination with the shrinking dimer method and Newtonian dynamics.**

G. Albareda, J. M. Bofill, I. De P. R. Moreira, W. Quapp, J. Rubio-Martínez.

*Theor. Chem. Acc.*, 137 (2018) 73.



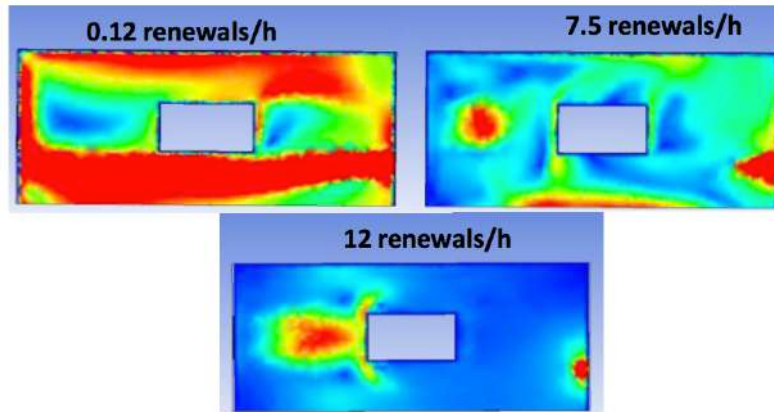
La combinació del mètode proposat amb la dinàmica Newtoniana (dissipativa) dona lloc a un esquema pràctic per a l'exploració exhaustiva de energies de potencial. Aquest fet s'indica a la figura per a la superfície d'energia potencial 2D de Rastrigin, on coexisteixen múltiples camins de reacció.

En aquest treball es re-visita el mètode "*gentlest ascent dynamics*" per trobar punts de sella en superfícies de potencial multi-dimensionals. Es discuteix la naturalesa variacional del mètode i es proposa un algoritme per integrar les equacions de moviment corresponents. La combinació d'aquest mètode amb dinàmica Newtoniana (dissipativa) es proposa com a esquema pràctic per a l'exploració exhaustiva de superfícies de potencial.

### Immission Assessment Inside an Industrial Ventilated Room Using CFD.

V. Plesu, A. E. Bonet-Ruiz, J. Bonet, P. Iancu, J. Llorens, L. I. Becerra.

Chem. Eng. Trans., 70 (2018) 1825.



Dependència de les zones mortes amb el número de renovacions per hora.

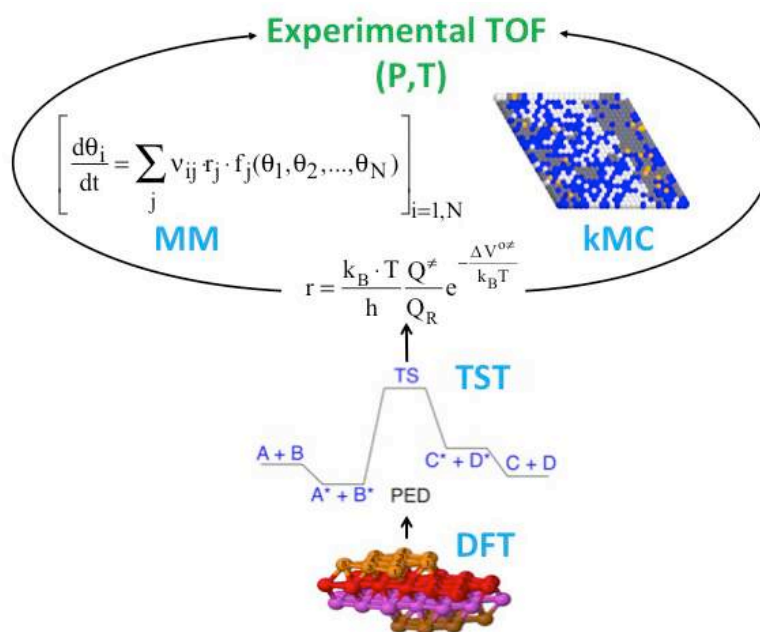
Actualment el disseny la ventilació de recintes tancats es basa en uns valors de renovacions d'aire per hora tabulades. Aquest aproximat procediment s'empra de fa molts anys però ara és un exercici computacional relativament simple calcular quan i on es sobrepassen el límits de vapors recomanables per la salut. Un senzill anàlisi de CFD ens permet generar un entorn virtual on proposar les mesures adients. S'ha simulat les concentracions de contaminants en una nau tant per una emissió continua com sobtada i s'ha observat que els resultats es corresponent amb mesures de camp disponibles. Un disseny que compleix les renovacions d'aire legislades pot en pràctica assolir concentracions nocives. La legislació s'hauria de basar en resultats de CFD en comptes de valors generals tabulats que en ocasions poder dur a un sobredimensionament o ésser insuficients.

**LÍNIA 2. CIÈNCIA DELS MATERIALS COMPUTACIONAL**

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. Quantum Chem., 118 (2018) e25518.

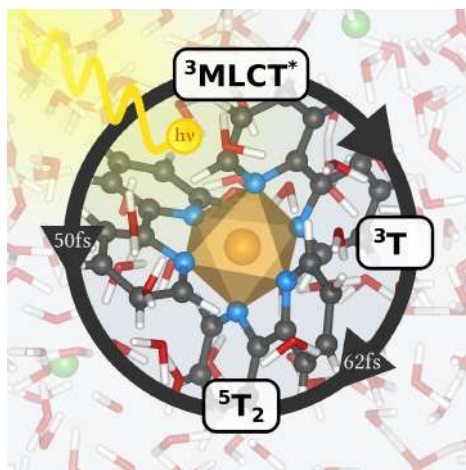


En aquest article, es revisen detalladament els mètodes kinetic Monte Carlo (kMC) i Models Microcinètics (MM) aplicats a l'estudi de la catalisi heterogènia emprant dades DFT. A més, es destaquen diverses qüestions importants que cal tenir en compte en la descripció correcta de les reaccions gas-superfície. Per exemple, proporcionem una estimació quantitativa de l'efecte d'incloure o no els processos de difusió o les interaccions laterals en simulacions kMC. Aquest article pot servir com a breu tutorial per a tots els interessats que s'inicien en aquesta àrea.

**Theoretical evidence for the direct  $^3\text{MLCT-HS}$  deactivation in the light-induced spin crossover of Fe(II)–polypyridyl complexes**

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

*Phys. Chem. Chem. Phys.*, 20 (2018) 2351.



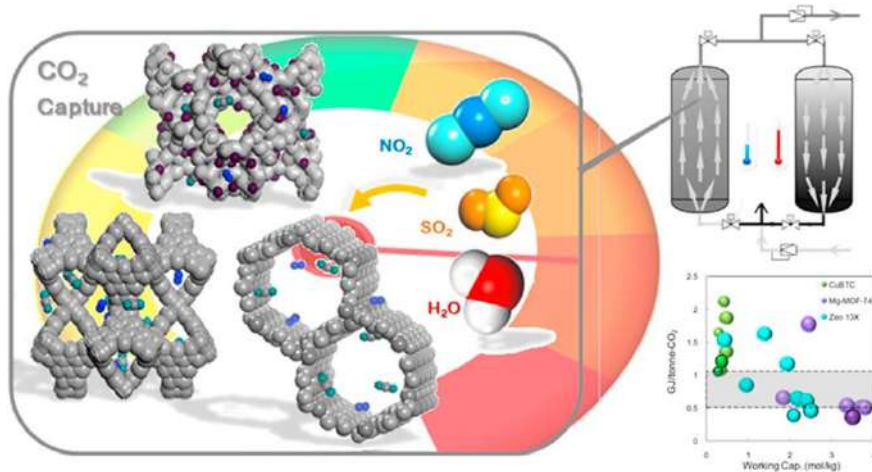
La inclusió d'efectes de segon ordre a l'acoblament espín-òrbita juntament amb distorsions estructurals activa el pas de  $^3\text{MLCT}$  a  $^5\text{T}_2$  en complexos polipiridílics de Fe(II).

La importància de les distorsions geomètriques i de l'acoblament espín-òrbita a segon ordre en les constants de velocitat dels processos de creuament d'estats de diferent espín induïts per radiació s'ha mostrat pel cas del complex  $[\text{Fe}(\text{bpy})_3]^{2+}$ . Els resultats obtinguts mostren un canal directe de desactivació des de l'estat  $^3\text{MLCT}$  fins l'estat final  $^5\text{T}_2$  quan es considera el desordre estructural, sense necessitat d'involucrar estats intermedis triplet.

**Energetic evaluation of swing adsorption processes for CO<sub>2</sub> capture in selected MOFs and zeolites: effect of impurities**

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

Chem. Eng. J., 324 (2018) 458.



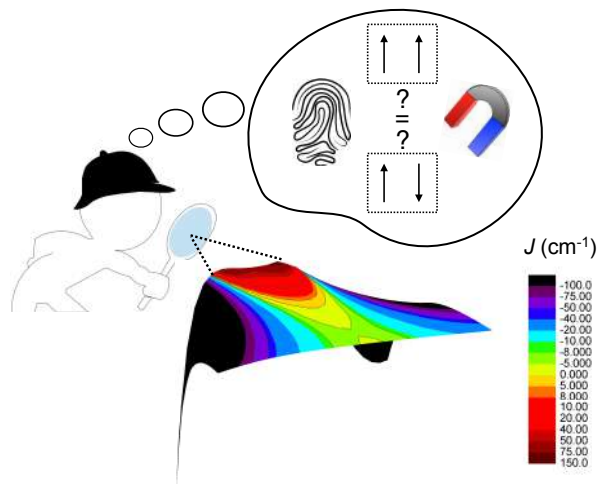
Materiales adsorbents y contaminantes usados en la simulación de procesos de adsorción.

Se presenta un estudio computacional sistemático de Mg-MOF-74, CuBTC y la zeolita 13X para la separación de CO<sub>2</sub> de mezclas multicomponente de procesos de post-combustión. El impacto de las impurezas se ha evaluado a nivel molecular y en condiciones de proceso. Los resultados muestran que el NO<sub>2</sub> tiene poco impacto en el rango de P y T estudiado. En el caso del H<sub>2</sub>O y del SO<sub>2</sub> los requerimientos energéticos se reducen al incrementar el contenido de impurezas y tanto la recuperación como la pureza se incrementan hasta un punto óptimo donde existe una competencia por los *sítes* de adsorción del CO<sub>2</sub> produciendo un descenso brusco en la pureza.

**The magnetic fingerprint of dithiazolyl-based molecule magnets**

T. Francese, J. Ribas-Arino, J. J. Novoa, R. W. A. Havenith, R. Broer, C. de Graaf, M. Deumal.

**Phys. Chem. Chem. Phys.**, 20 (2018) 20406.



La biestabilitat magnètica que presenten certs materials basats en radicals orgànics té el potencial de ser usada en futurs dispositius electrònics. En aquest article, hem presentat els resultats d'un estudi de primers principis bottom up amb la finalitat d'identificar els factors que defineixen les diferents propietats magnètiques de les fases de baixa i alta temperatura de quatre materials basats en radicals ditiazolil que presenten transició de spin. El canvi en la resposta magnètica que acompanya la transició de spin és degut a canvis en les constants d'acoblament magnètic entre radicals veïns que es troben en una mateixa columna tipus  $\pi$ . No només s'han identificat els paràmetres estructurals que controlen aquests canvis (distància interplanar i desplaçament lateral), sinó que també s'han identificat determinades configuracions que condueixen a un acoblament ferromagnètic entre radicals. L'ús de substituents adequats en el radical de ditiazolil pot donar lloc, per tant, a materials orgànics amb interaccions ferromagnètiques dominants.

**Properties of hydrated TiO<sub>2</sub> and SiO<sub>2</sub> nanoclusters: dependence on size, temperature and water vapour pressure**

A. Cuko, A. Macia-Escatllar, M. Calatayud, S. T. Bromley.

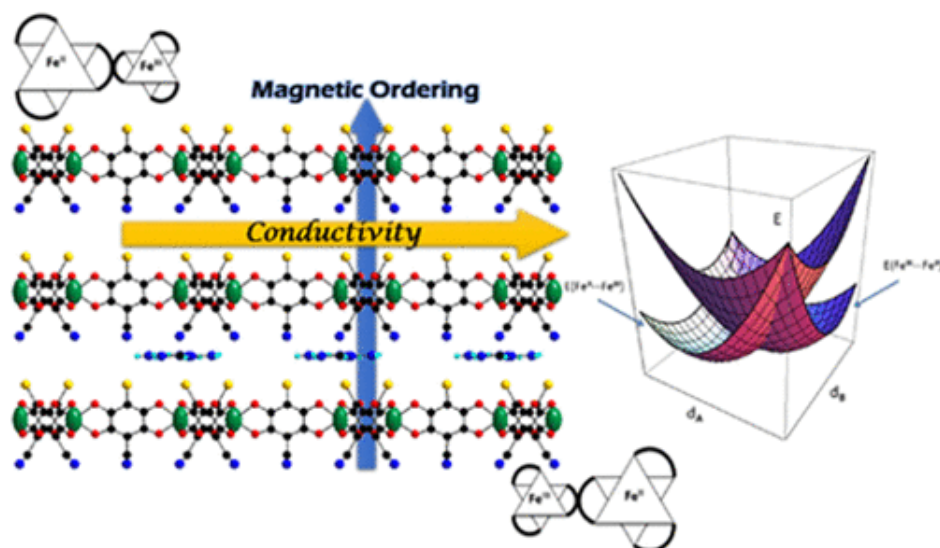
*Nanoscale*, 10 (2018) 21518.

Les energies lliures de nanoclusters de sílice i d'òxid de titani (IV) es modelen amb precisió pel que fa a la mida, la temperatura i la pressió del vapor d'aigua.

### Conducting Anilate-Based Mixed-Valence Fe(II)Fe(III) Coordination Polymer: Small-polaron Hopping Model for Oxalate-Type Fe(II)Fe(III) 2D Networks

S. Sahadevan, A. Abhervé, N. Monni, C. Sáenz de Pipaón, J. R. Galan-Mascaros, J. Waerenborgh, B. Vieira, P. Auban-Senzier, S. Pillet, E. Bendeif, P. Alemany, E. Canadell, M.L. Mercuri, N. Avarvari.

*J. Am. Chem. Soc.* 140 (2018) 12611-12621.



Estructura cristal·lina del polímer de coordinació mostrant les capes de  $\text{Fe}^{\text{II}}\text{Fe}^{\text{III}}(\text{anilat})_3$  i la direcció de la conductivitat elèctrica i l'ordenament magnètic. A la part dreta es mostra la superfície de potencial per al desplaçament del polaró petit representat esquemàticament a les parts superior i inferior de la figura.

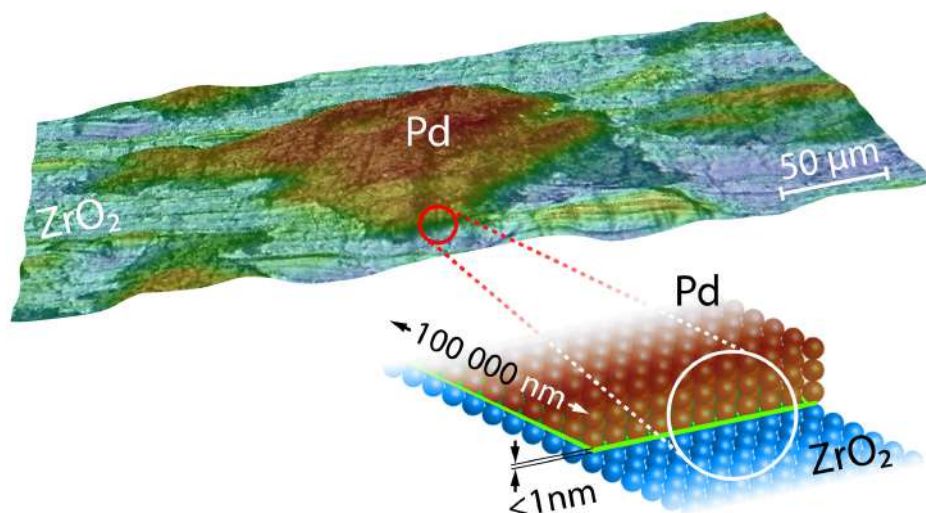
En aquest treball es presenta un estudi multidisciplinar de les propietats elèctriques i magnètiques d'un interessant polímer de coordinació de ferro amb el lligand anilat. Les mesures mostren que es tracta d'un compost de valència mixta Fe(II)-Fe(III) amb una conductivitat elèctrica excepcionalment alta para a aquest tipus de compostos. Per respondre a la pregunta sobre l'origen d'aquest fenomen, en l'article proposem un modelo de conductivitat per polarons petits que, a partir de càlculs químic-quàntics senzills per a un monòmer  $\text{Fe}(\text{anilat})_3$ , permet explicar perquè la conductivitat és molt més alta que la observada en polímers de la mateixa família obtinguts amb anions oxalat o esquat.



**The role of metal/oxide interfaces for long-range metal particle activation during CO oxidation**

Y. Suchorski, S. M. Kozlov, I. Bespalov, M. Datler, D. Vogel, Z. Budinska, K. M. Neyman, G. Rupprechter.

**Nature Materials** 17 (2018) 519.



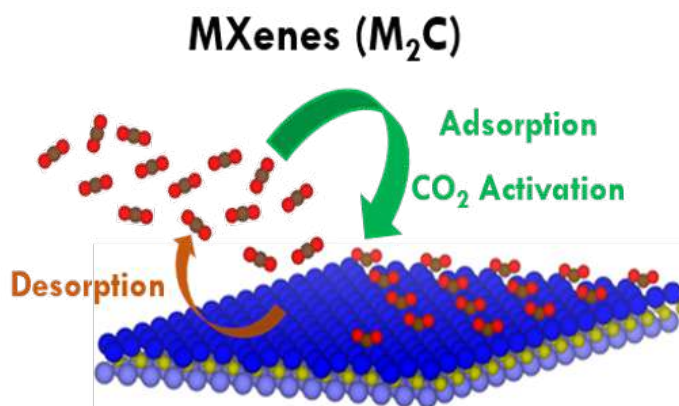
Una petita línia de contacte entre el gra de Pd i el suport afecta fortament l'oxidació de CO en tot el gra que és cent mil vegades més gran.

Per a les partícules catalítiques de milers d'àtoms, el suport no hauria d'afectar les reaccions químiques que es produeixen molt lluny. No obstant això, s'ha visualitzat un sorprenent efecte a llarg abast dels suports, que pot fer que els convertidors catalítics d'automòbils siguin més eficients reduint l'emissió del tòxic CO. Els processos químics en catalitzadors microcristal·lins de pal·ladi van canviar significativament, quan aquestes partícules van ser depositades sobre suports d'òxids metàl·lics inerts. És a dir, les partícules es mantenen actives per oxidar CO a una pressió de CO superior. Una línia estreta de contacte entre el gra i el suport va influenciar l'oxidació de CO en tot el gra micromètric de pal·ladi. Els experiments van revelar que la desactivació del catalitzador comença amb contactes entre el gra i el suport, i des d'allí la desactivació s'estén com una ona de tsunami sobre tot el gra. Aquestes observacions són racionalitzades mitjançant càlculs que mostren la unió més forta d'oxigen sobre àtoms de pal·ladi en contacte directe amb el suport.

**CO<sub>2</sub> Abatement Using Two-Dimensional MXene Carbides**

Á. Morales-García, A. Fernández-Fernández, F. Viñes, F. Illas.

**J. Mater. Chem. A.**, 6 (2018) 3381.



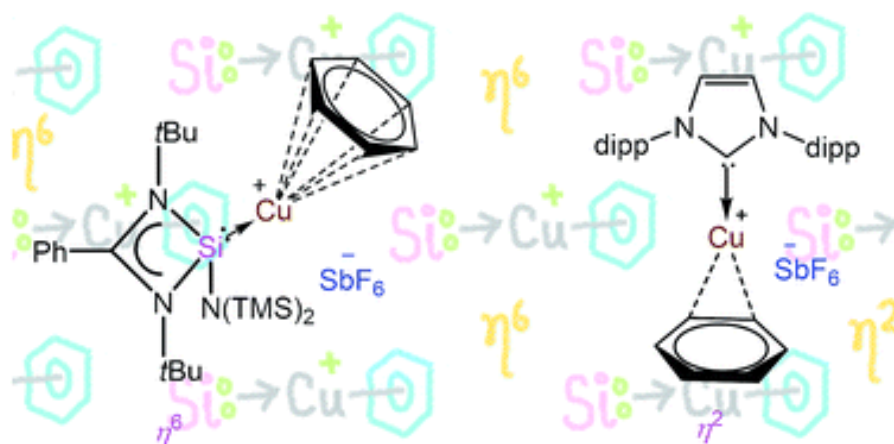
Activació i captura de CO<sub>2</sub> en carburs de MXenes.

La creixent concentració de diòxid de carboni (CO<sub>2</sub>) en l'atmosfera és un dels principals responsables de l'efecte hivernacle, l'escalfament global i l'acidificació oceànica. Els materials MXenes són candidats força prometedors per a la captura de CO<sub>2</sub>, emmarcat dins les tecnologies de captura i emmagatzematge de carboni (CCS). Mitjançant investigacions emprant la teoria funcional de la densitat, s'ha demostrat la forta adsorció i activació del CO<sub>2</sub> en MXenes de carburs amb estequiometria M<sub>2</sub>C (M = Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta, Cr, Mo, W), on s'han estimat les velocitats d'adsorció i desorció, cosa que permet preveure una forta capacitat d'adsorció de CO<sub>2</sub> fins i tot a baixes pressions parcials de CO<sub>2</sub> i altes temperatures. Els materials M<sub>2</sub>C presenten unes capacitats destacables de càrrega de CO<sub>2</sub> que oscil·len entre 2,34 i 8,25 mol CO<sub>2</sub> per kg de MXene, cosa que els fa materials pràctics per a l'eliminació del CO<sub>2</sub> de l'atmosfera.

**Taming a monomeric  $\text{Cu}(\eta^6\text{-C}_6\text{H}_6)^+$  complex with silylene**

N. Parvin, S. Pal, J. Echeverria, S. Alvarez, S. Khan.

**Chem. Sci.**, 9 (2018) 4333-4337.



Diferent mode de coordinació del benzè a  $\text{Cu(I)}$  depenent dels altres lligands.

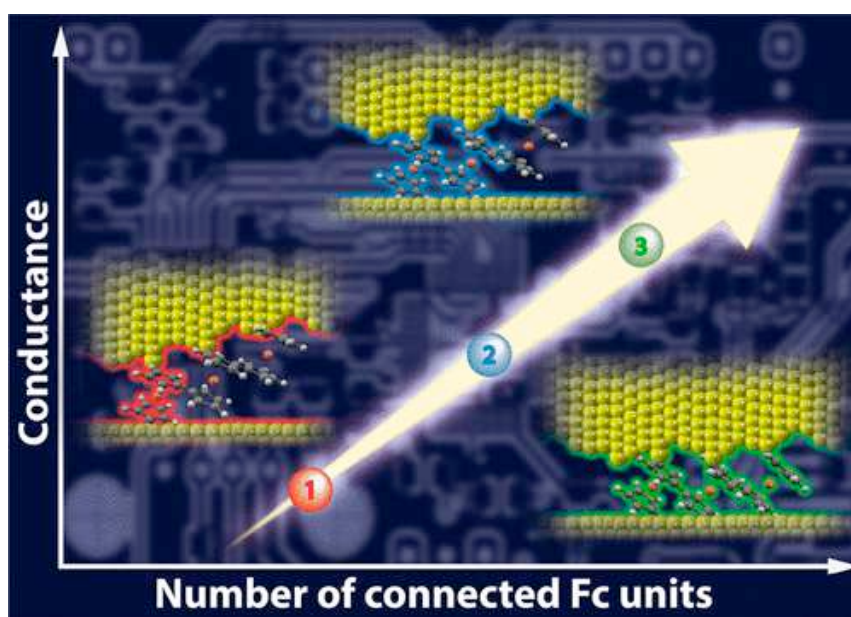
Un estudi computacional d'un complex amb benzè  $\pi$ -coordinat a coure(I) mostra la subtil combinació de factors estèrics i electrònics que afavoreix aquest mode de coordinació en l'únic compost d'aquest tipus conegut fins ara, sintetitzat pel grup de S. Khan a l' *Indian Institute of Science Education and Research* de Pune. Basats en les explicacions proposades i en càlculs addicionals, s'han fet prediccions d'altres possibles nous compostos que haurien de presentar també aquest mode de coordinació entre benzè i coure.

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

**Control over Near-Ballistic Electron Transport through Formation of Parallel Pathways in a Single-Molecule Wire**

A. C Aragonès, N. Darwish, S. Ciampi, L. Jiang, R. Roesch, E. Ruiz, C. A Nijhuis, I. Díez-Pérez.

*J. Am. Chem. Soc.*, 141 (2018) 240.

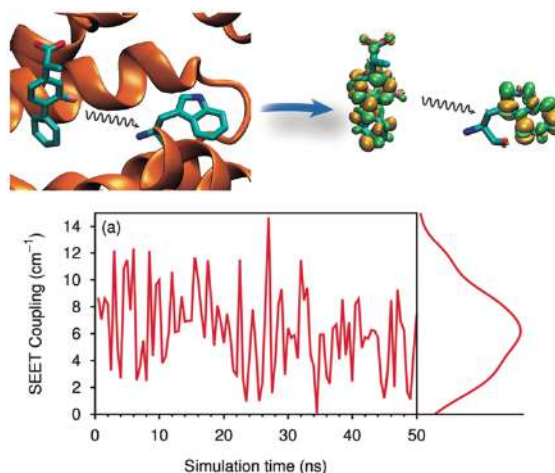


Aquest treball demostra la possibilitat de formar contactes elèctrics moleculars amb conductàncies aproximant el límit teòric balístic d'un contacte nanoscòpic. L'estratègia es basa en l'ús de grups molecular redox connectats en paral·lel entre dos metalls.

### Electronic energy transfer in biomacromolecules

L. Cupellini, M. Corbella, B. Mennucci, C. Curutchet.

**WIREs Comput. Mol. Sci.**, 2018, in press, doi: 10.1002/wcms.1392.

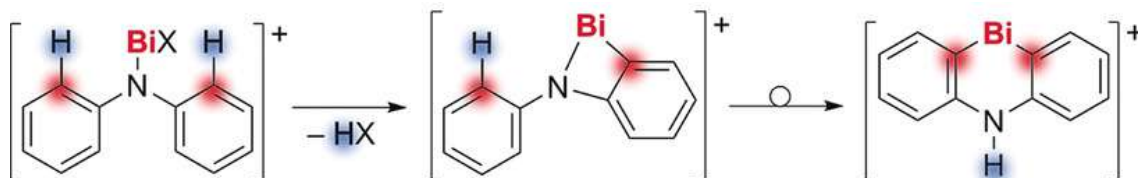


Les simulacions moleculars de processos de transferència d'energia en biomolècules permeten superar els principals límits de la teoria de Förster: l'aproximació de dipols puntuals, els efectes d'apantallament, i la deslocalització excitònica.

La transferència d'energia electrònica és àmpliament usada per a mesurar distàncies i interrogar l'estructura de biomacromolècules, i realitza una tasca clau a la fotosíntesi transportant l'energia recollida a través de complexos pigment–proteïna especialitzats. La teoria de Förster, introduïda fa més de 70 anys, permet relacionar les velocitats de transferència amb senzilles propietats estructurals i espectroscòpiques de les molècules participants. En biosistemes, però, sovint s'observen desviacions significatives del comportament descrit per Förster a causa de fallades en l'aproximació de dipols puntuals, pels efectes d'apantallament dielèctric induïts per l'entorn biològic, o per desviacions respecte al règim d'acoblament dèbil. En aquest article de revisió donem una perspectiva dels avenços en simulacions de transferència d'energia en biomacromolècules que permeten superar els principals límits de la teoria de Förster.

**Double CH activation of a masked cationic bismuth amide**

B. Ritschel, J. Poater, H. Dengel, F. M. Bickelhaupt, C. Lichtenberg.

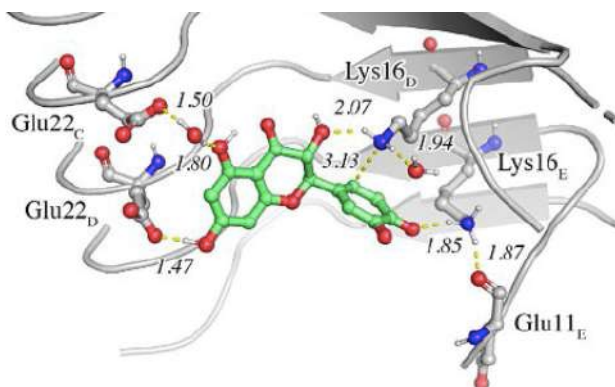
**Angew. Chem. Int. Ed.**, 57 (2018) 3825-3829.

La transformació dels enllaços C-H en enllaços C-M més reactius, més funcionals, té una importància fonamental en la química sintètica. Aquí es demostra que la transformació de compostos de bismut neutre en els seus anàlegs catiónics es pot utilitzar com una estratègia per facilitar les reaccions d'activació de CH. Concretament, es presenta la doble activació CH de difenil amida (NPh<sub>2</sub>)<sup>-</sup> amb bismut, juntament amb procediments senzills per a la funcionalització de les posicions activades. Els productes organometàl·lics dels primers i segons passos d'activació de CH es van aïllar en alts rendiments. L'anàlisi per espectroscòpia de RMN, difracció de raigs X de monocristal, i càlculs DFT van revelar les propietats inusuals (per exemple, tensió anular, heteroaromaticitat moderada) i va proporcionar una visió mecanística de la formació d'aquests compostos.

**Computational Study of the Aza-Michael Addition of the Flavonoid (+)-Taxifolin in Inhibition of  $\beta$ -Amyloid Fibril Aggregation**

T. Ginex, M. Trius, F. J. Luque.

**Chem. Eur. J.**, 24 (2018) 5813-5824.



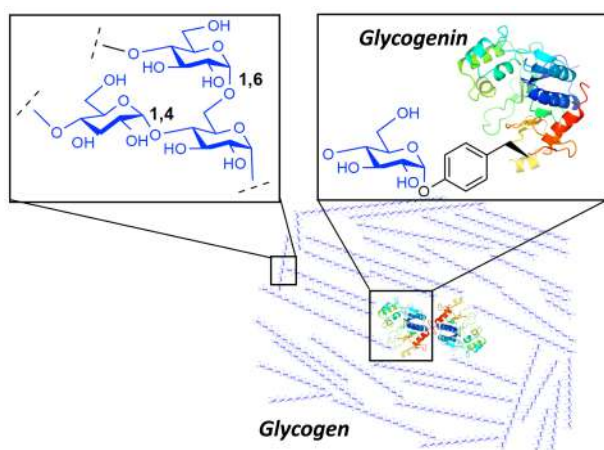
Detall de la unió de (+)-taxifolina a  $\beta$ -amiloide.

La formació d'adductes covalents amb fibril·les amiloides que interfereixen amb el procés d'agregació obre noves perspectives d'intervenció en malalties amiloidogèniques. Aquest estudi examina el mecanisme de formació d'un adducte covalent entre la forma oxidada de (+)-taxifolina i el  $\beta$ -amiloide (A $\beta$ 42). Els resultats donen suport a un motiu de reconeixement específic que permet la reacció química amb A $\beta$ 42. Aquest mecanisme, que pot explicar l'activitat antiagregant de flavonoides oxidats, és prometedora per desenvolupar teràpies que puguin modificar la progressió de malalties amiloidogèniques.

**Palladium-mediated enzyme activation suggests multiphase initiation of glycogenesis**

M. K. Bilyard, H. Bailey, L. Raich, M. Gafitescu, T. Machida, J. Iglesias-Fernández, S. S. Lee, C. D. Spicer, C. Rovira, W. W. Yue, B. G. Davis.

**Nature**, 563 (2018) 235.



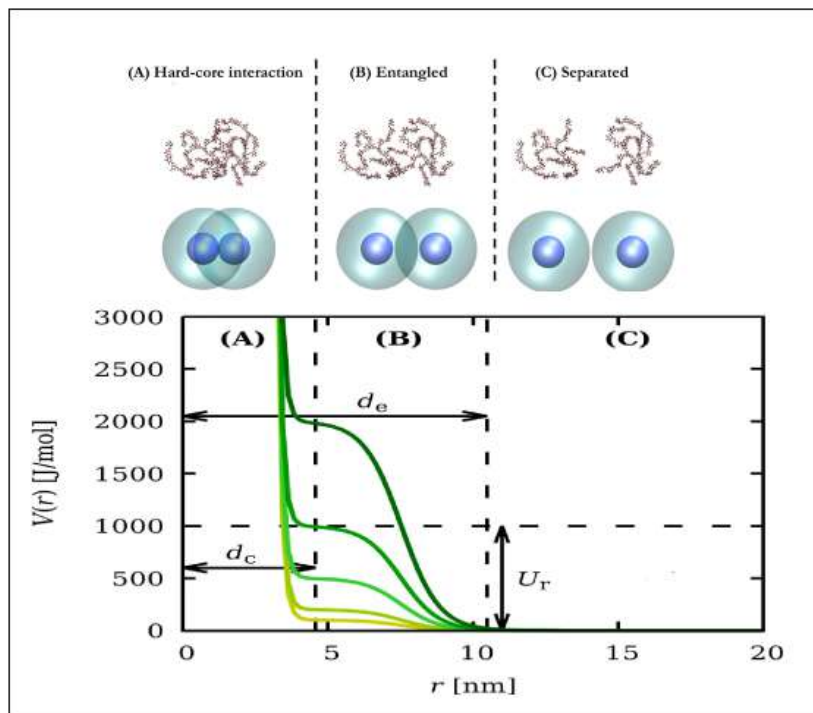
El glicogen és la molècula clau per a la reserva d'energia en humans, animals i fongs. És on la glucosa que ens alimenta s'emmagatzema i allibera quan es necessita. Al cor de la partícula de glicogen hi ha una proteïna que el va formant a base de catalitzar la seva pròpia autoglicosilació, és a dir, es va decorant ella mateixa amb molècules de glucosa. Entendre el funcionament d'aquesta proteïna – anomenada glicogenina – ha estat sempre difícil ja que actua alhora com a catalitzador i com substrat i, per tant, canvia continuament durant el procés. En aquest treball hem desxifrat el mecanisme d'acció de la glicogenina mitjançant càlculs de dinàmica molecular i experiments d'activació enzimàtica mitjançant pal·ladi. Els resultats mostren un procés de creixement del glicogen sorprenentment tolerant i alhora precís. Aquesta metodologia permet atrapar estadis intermedis del glicogen mitjançant control químic i pot esdevenir una eina molt útil en l'estudi de mecanismes enzimàtics.



**Macromolecular diffusion in crowded media beyond the hard-sphere model**

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

**Soft Matter** 14 (2018) 3105-3114.



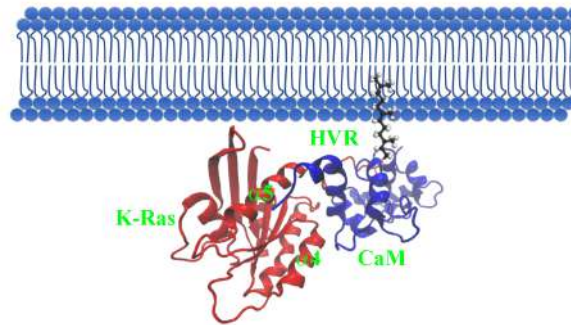
Esquema del model *Chain Entanglement Soft Potential* (CESP). Les macromolècules es representen com esferes amb dues capes. L'externa (transparent) té en compte la interacció entre les branques, la interna (opaca) la repulsió estèrica entre nuclis.

Es presenta un estudi de l'efecte del *crowding* macromolecular en la difusió de proteïnes que va més enllà de l'aproximació clàssica d'esferes dures. Es proposa un nou model d'esferes toves, el model *Chain Entanglement Soft Potential* (CESP), que té en compte factors com la flexibilitat macromolecular i l'entrellaçament entre cadenes. El model CESP fa ús d'un potencial d'interacció intermolecular *shouldered-shaped* el qual s'implementa dintre de simulacions de Dinàmica Browniana (DB). El potencial només conté un paràmetre,  $U_r$ , relacionat amb el cost energètic de l'entrellaçament inter-macromolecular. Aquest model s'utilitza per analitzar la difusió de la proteïna estreptavidina en medis amb una alta concentració de dextrans. Els valors obtinguts pel coeficient de difusió a temps llargs  $D^{\text{long}}$  i el coeficient de difusió anòmala  $\alpha$ , prediuen quantitativament el comportament observat experimentalment i suposen una millora respecte als obtinguts fent ús del clàssic model d'esferes dures.

### Modeling and subtleties of K-Ras and Calmodulin interaction

E. Garrido, J. Lázaro, M. Jaumot, N. Agell, J. Rubio-Martínez.

*PLoS Comput. Biology*, 14 (2018) e1006552.



Model proposat per a la unió del complex K-Ras/Calmodulina a la membrana plasmàtica.

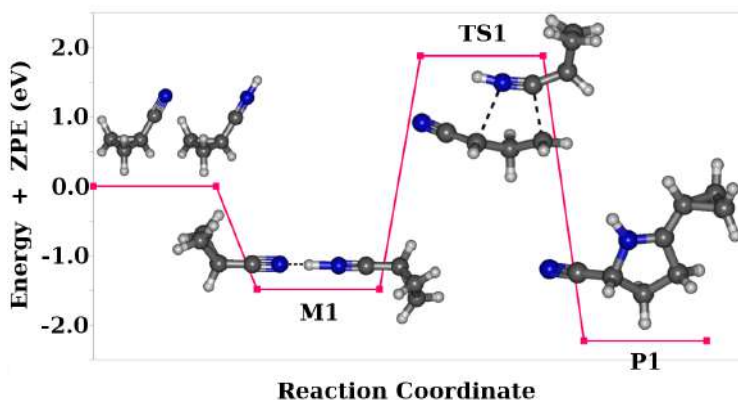
En el present treball utilitzant diferents tècniques de modelatge computacional, es va obtenir un model per a la interacció K-Ras / Calmodulina que coincideix amb les dades experimentals. Creiem que el model actual ajudarà a entendre millor la regulació de K-Ras i dissenyar nous inhibidors. Per exemple, basant-nos en el nostre model, podem predir que la interacció pot tenir lloc a la membrana plasmàtica i que, ja que la superfície de K-Ras que interactua amb la Calmodulina és la mateixa que la que utilitza per a la dimerització, els mimètics de Calmodulina poden inhibir la dimerització de K-Ras.

## LÍNIA 4. REACTIVITAT I DINÀMICA DE REACCIONS

## The reactivity of the Cyclopropyl cyanide in Titan's atmosphere: a possible prebiotic mechanism

E. López, D. Ascenzi, P. Tosi, J. M. Bofill, J. de Andrés, M. Albertí, J. M. Lucas, A. Aguilar.

Phys. Chem. Chem. Phys., 20 (2018) 6198.

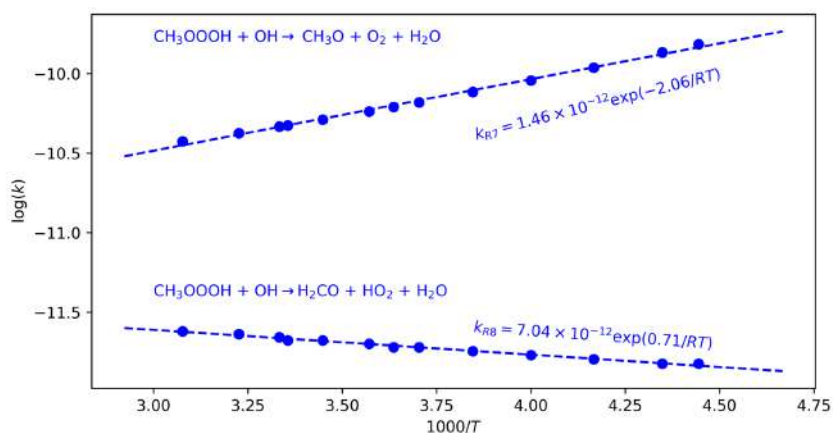


Perfil esquemàtic d'energia potencial a nivell MP2 que mostra els diferents punts estacionaris i les seves estructures al llarg del camí de la reacció adiabàtica  $C_4H_5N + C_4H_5NH^+$  i que condueix a la formació de l'estructura covalent de l'adducte P1 de l'estat singlet fonamental del sistema.

El cianur ciclopropil i altres nitrils simples detectats a l'atmosfera de Titan podrien ser precursors que condueixen a la formació de macromolècules orgàniques en la seva atmosfera. Els experiments de reacció realitzats entre el cianur de ciclopropil i la seva forma protonada, a més dels adductes ió-molècula esperats estabilitzats per interaccions de llarg abast no covalents, condueixen a una altra espècie diferent que té la mateixa relació de massa/càrrega ( $m/z$ ) de 135 com es demostra en aquest treball. A partir d'un estudi previ sobre la superfície d'energia potencial de cianur neutre (PES) que mostra un caràcter biradical parcial, s'ha pogut caracteritzar la formació a través de la reacció bimolecular d'una nova molècula orgànica cíclica al nivell de teoria ab initio Möller-Plesset (MP2), assegurant-se la connectivitat dels punts estacionaris emprant el mètode de la coordenada de la reacció intrínseca (IRC). Per a caracteritzar l'estat de transició de la reacció, es van fer càlculs de multireferència utilitzant un espai actiu complet que incloïa sis electrons i sis orbitals moleculars [CAS (6 e-, 6 m.)]. Aquest estudi obre la possibilitat d'explorar la formació de noves molècules orgàniques mitjançant esquemes d'interacció iònica en fase gasosa, les quals tenen rellevància en l'espai interestel·lar i en l'astrobiologia (i poden estar implicats en l'evolució molecular de la prebiòtica).

**Tropospheric oxidation of methyl hydrotrioxide (CH<sub>3</sub>OOH) by hydroxyl radical**

J. M. Anglada, A. Solé.

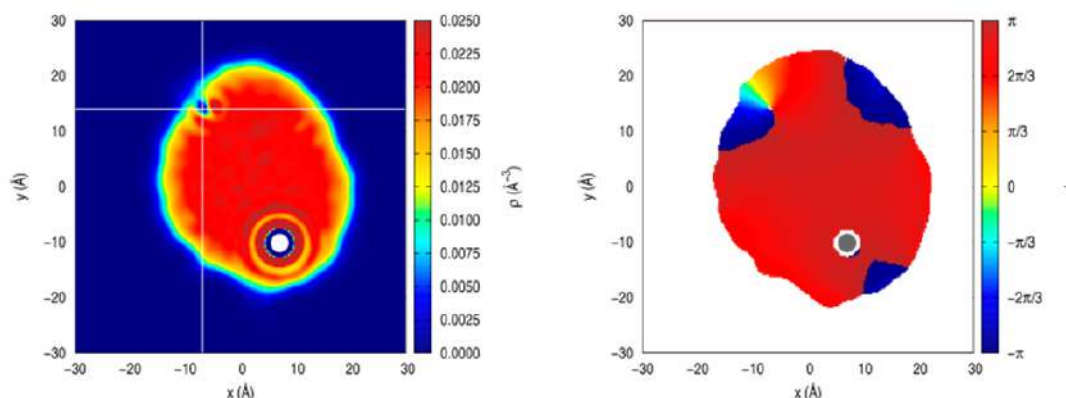
**Phys. Chem. Chem. Phys.**, 20 (2018) 27406-27417.

Hem emprat mètodes teòrics d'alt nivell per investigar l'oxidació del metil hidrotriòxid pel radical hidroxil, que és d'interès en la investigació en química atmosfèrica. La reacció pot tenir lloc per l'abstracció de l'àtom d'hidrogen terminal del grup OOH que produeix CH<sub>3</sub>O, O<sub>2</sub> i H<sub>2</sub>O, o d'un àtom d'hidrogen del grup CH<sub>3</sub> formant H<sub>2</sub>CO, HO<sub>2</sub> i H<sub>2</sub>O. Les constants de velocitat obtingudes per les dues reaccions a 298 K són  $4.7 \times 10^{-11}$  i  $2.1 \times 10^{-12}$  cm<sup>3</sup> molec<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>, respectivament, és a dir, l'abstracció de l'àtom d'hidrogen terminal del grup OOH és aproximadament 22 vegades més ràpida que la d'un àtom d'hidrogen del grup CH<sub>3</sub>. La constant de velocitat obtinguda per la reacció global CH<sub>3</sub>OOH + OH és de  $4.9 \times 10^{-11}$  cm<sup>3</sup> molec<sup>-1</sup> s<sup>-1</sup>. Els nostres càlculs prediuen percentatges entre el 99,0 i el 93,9% per a la formació de radical metoxi més l'oxigen molecular i l'aigua, i entre 1,0 i 6,1% per a la formació de formaldehid, més hidroperoxil radical i aigua, en l'interval de temperatures 225-325 K. El temps de vida del CH<sub>3</sub>OOH a la troposfera es preveu que va des d'1,8 hores a 225 K, fins a 3,9 hores a 275 K i disminueix fins a 0,2 hores a 310 K.

### Quantum-classical dynamics of the capture of neon atoms by superfluid helium nanodroplets

M. Blancafort-Jorquera, A. Vila, M. González.

*Phys. Chem. Chem. Phys.*, 20 (2018) 29737.



Vòrtex quàntic a la part superior esquerra de la densitat de l'heli (esquerra) i de la fase de la funció d'ona de l'heli (dreta), per a la velocitat més probable del Ne a 300 K ( $v_0=500 \text{ m s}^{-1}$ ), paràmetre d'impacte  $b=17 \text{ \AA}$  i temps final de simulació (171.2 ps).

La captura d'un àtom de Ne per una nanogota d'heli superfluid,  $\text{Ne} + ({}^4\text{He})_N \rightarrow \text{Ne}@({}^4\text{He})_{N'} + (N-N') {}^4\text{He}$ , s'ha estudiat utilitzant un mètode híbrid quàntic (heli)-clàssic (Ne), tenint en compte per primera vegada el moment angular (i la formació de vòrtexs) d'una manera detallada. Es produeixen grans transferències d'energia i moment angular a la nanogota i el moment angular de l'àtom de Ne pot induir la nucleació de vòrtexs per moments angulars inicials prou elevats ( $\sim 176.3\text{-}220.3 \hbar$ ). Els vòrtexs sorgeixen del col·lapse d'excitacions superficials (rippbons) i són de llarga durada per algunes condicions. La comparació amb un estudi dinàmic quàntic previ del nostre grup amb moment angular zero mostra que els efectes quàntics no són importants en les condicions aquí examinades. A més, s'ha realitzat una comparació amb l'escassa informació disponible per altres sistemes, mostrant la rica varietat de comportaments que es poden observar en la solvatació d'impureses per l'heli superfluid.

## III.2 LLISTA DE PUBLICACIONS

## ARTICLES PUBLICATS

1. *Biogas upgrading by transition metal carbides.*  
C. Kunkel, F. Viñes, F. Illas.  
**ACS Appl. Energy Mater.** 1 (2018) 43-47.
2. *Alkali metal cation effects in structuring Pt, Rh, and Au surfaces through cathodic corrosion.*  
T. J. P. Hersbach, I. T. McCrum, D. Anastasiadou, R. Wever, F. Calle-Vallejo, M. T. M. Koper.  
**ACS Appl. Mater. Interfaces** 10 (2018) 39363-39379.
3. *QM/MM studies into the H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-dependent activity of lytic polysaccharide monoxygenases: evidence for the formation of a caged hydroxyl radical intermediate.*  
B. Wang, E. M. Johnston, P. Li, S. Shaik, G. J. Davies, P. H. Walton, C. Rovira.  
**ACS Catal.** 8 (2018) 346–1351.
4. *Can an alcohol act as an acid/base catalyst in water solution? An experimental and theoretical study of imidazole catalysis of the aqueous Morita–Baylis–Hillman reaction.*  
L. Raich, H. Santos, J. C. Gomes, M. T. Rodrigues, R. Galaverna, M. N. Eberlin, F. Coelho, C. Rovira, A. Moyano.  
**ACS Catal.** 8 (2018) 1703–1714. editorially selected as *Hot Paper*.
5. *Structural and mechanistic insights into the catalytic domain-mediated short-range glycosylation preferences of GalNAc-T4.*  
M. de las Rivas, E. J. P. Daniel, H. Coelho, E. Lira-Navarrete, L. Raich, I. Compañón, A. Diniz, L. Lagartera, J. Jiménez-Barbero, H. Clausen, C. Rovira, F. Marcelo, F. Corzana, T. A. Gerken, R. Hurtado-Guerrero.  
**ACS Centr. Sci.** 4 (2018) 1274-1290.
6. *The molecular mechanism of substrate recognition and catalysis of the membrane acyltransferase PatA from mycobacteria.*  
M. Tersa, L. Raich, D. Albesa-Jové, B. Trastoy, J. Prandi, M. Gilleron, C. Rovira, M. E. Guerin.  
**ACS Chem. Biol.** 13 (2018) 131-140.
7. *Computational comparison of late transition metal (100) surfaces for the electrocatalytic reduction of CO to C<sub>2</sub> species.*  
S. Hanselman, M. T. M. Koper, F. Calle-Vallejo.  
**ACS Energy Lett.** 3 (2018) 1062-1067.
8. *An unprecedented stimuli-controlled single-crystal reversible phase transition of a metal-organic framework and its application to a novel method of guest encapsulation.*  
F. C. Tan, A. López-Periago, M. E. Light, J. Cirera, E. Ruiz, A. Borrás, F. Teixidor, C. Viñas, C. Domingo, J. G. Planas.  
**Adv. Mater.** 30 (2018) 1800726.

9. *Double CH activation of a masked cationic bismuth amide.*  
B. Ritschel, J. Poater, H. Dengel, F. M. Bickelhaupt, C. Lichtenberg  
**Angew. Chem. Int. Ed.** 57 (2018) 3825-3829.
10. *Subsurface carbon: a general feature of noble metals.*  
O. Piqué, I. Koleva, F. Viñes, H. Aleksandrov, G. N. Vayssilov, F. Illas.  
**Angew. Chem. Int. Ed.** doi: 10.1002/anie.201813037
11. *Recognition of shorter and longer trimethyllysine analogues by epigenetic reader proteins.*  
A. H. K. Al Temimi, R. Belle, K. Kumar, J. Poater, P. Betlem, B. J. G. E. Pieters, R. S. Paton, F. M. Bickelhaupt, J. Mecinovic.  
**Chem. Comm.** 54 (2018) 2409-2412.
12. *Energetic evaluation of swing adsorption processes for CO<sub>2</sub> capture in selected MOFs and zeolites: effect of impurities.*  
D. Bahamon, A. Díaz-Márquez, P. Gamallo, L. F. Vega.  
**Chem. Eng. J.** 342 (2018) 458-473.
13. *Immission Assessment Inside an Industrial Ventilated Room Using CFD.*  
V. Plesu, A. E. Bonet-Ruiz, J. Bonet, P. Iancu, J. Llorens, L. I. Becerra.  
**Chem. Eng. Trans.** 70 (2018) 1825-1830.
14. *Surrogate Model for Carbon Dioxide Equilibrium Absorption Using Aqueous Monoethanolamine.*  
V. Plesu, J. Bonet, A.E. Bonet-Ruiz, A. Chavarria, P. Iancu, J. Llorens.  
**Chem. Eng. Trans.** 70 (2018) 919-924.
15. *A heuristic for extractive agent flow rate in extractive distillation.*  
V. Plesu, S. Cantero, A. E. Bonet-Ruiz, J. Bonet, P. Iancu, J. Llorens.  
**Chem. Eng. Trans.** 70 (2018) 1849-1854.
16. *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.** 24 (2018) 5146-5152.
17. *Theory uncovers the role of the methionine-tyrosine-tryptophan radical adduct in the catalase reaction of KatGs: O<sub>2</sub> release mediated by proton-coupled electron transfer.*  
B. Wang, I. Fita, C. Rovira.  
**Chem. Eur. J.** 24 (2018) 5388-5395.
18. *Computational study of the aza-Michael addition of the flavonoid (+)-taxifolin in inhibition of  $\beta$ -amyloid fibril aggregation.*  
T. Ginex, M. Trius, F. J. Luque.  
**Chem. Eur. J.** 24 (2018) 5813-5824.

19. *A pseudo-octahedral Cobalt(II) complex with bispyrazolylpyridine ligands acting as a zero-field single-molecule magnet with easy axis anisotropy.*  
L. Rigamonti, N. Bridonneau, G. Poneti, L. Tesi, L. Sorace, D. Pinkowicz, J. Jover, E. Ruiz, R. Sessoli, A. Cornia.  
**Chem. Eur. J.** 24 (2018) 8857-8868.
  
20. *Boosting self-assembly diversity in the solid-state by chiral/non-chiral Zn<sup>II</sup>-porphyrin crystallization.*  
W. J. Qian, A. González-Campo, A. Pérez-Rodríguez, S. Rodríguez-Hermida, I. Imaz, K. Wurst, D. Maspoch, E. Ruiz, C. Ocal, E. Barrena, D. B. Amabilino, N. Aliaga-Alcalde.  
**Chem. Eur. J.** 24 (2018) 12950-12960.
  
21. *Multiple multicomponent reactions: unexplored substrates, selective processes and versatile chemotypes in biomedicine.*  
O. Ghashghaei, S. Caputo, M. Sintes, M. Revés, N. Kielland, C. Estarellas, F. J. Luque, A. Aviñó, R. Eritja, A. Serna-Gallego, J. A. Marrugal-Lorenzo, J. Pachón, J. Sánchez-Céspedes, R. Treadwell, F. de Moliner, M. Vendrell, R. Lavilla.  
**Chem. Eur. J.** 24 (2018) 14513-14521.
  
22. *Oxazoline or oxazolinium ion? the protonation state and conformation of the reaction intermediate of chitinase enzymes revisited.*  
J. Coines, M. Alfonso-Prieto, X. Biarnés, A. Planas, C. Rovira.  
**Chem. Eur. J.** 24 (2018) 19258-19265.
  
23. *Deactivation of excited states in transition-metal complexes: insight from computational chemistry.*  
C. Sousa, M. Alías, A. Domingo, C. de Graaf.  
**Chem. Eur. J.** (2018) doi: 10.1002/chem.201801990.
  
24. *Mechanical tuning of through-molecule conductance in a conjugated calix [4] pyrrole.*  
D. Stefani, M. Perrin, C. Gutiérrez-Cerón, A. C. Aragonès, J. Labra-Muñoz, R. D. C. Carrasco, Y. Matsushita, Z. Futera, J. Labuta, T. H. Ngo, K. Ariga, I. Díez-Pérez, H. S. J. van der Zant, D. Dulić, J. P. Hill.  
**ChemistrySelect** 3 (2018) 6473-6478.
  
25. *A global optimisation study of the low-lying isomers of the alumina octamer (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>)<sub>8</sub>.*  
D. Gobrecht, L. Decin, S. Cristallo, S. T. Bromley.  
**Chem. Phys. Lett.** 711 (2018) 138-147.
  
26. *Taming a monomeric Cu( $\eta^6$ -C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>)<sup>+</sup> complex with silylene.*  
N. Parvin, S. Pal, J. Echeverria, S. Alvarez, S. Khan.  
**Chem. Sci.** 9 (2018) 4333-4337.



27. *Electric-field induced bistability in single-molecule conductance measurements for boron coordinated curcuminoid compounds.*  
I. J. Olavarria-Contreras, A. Etcheverry-Berrios, W. J. Qian, C. Gutierrez-Ceron, A. Campos-Olguin, E. C. Sanudo, D. Dulic, E. Ruiz, N. Aliaga-Alcalde, M. Soler, H. S. J. van der Zant.  
**Chem. Sci.** 9 (2018) 6988-6996.
28. *Harnessing electrostatic catalysis in single molecule, electrochemical and chemical systems: a rapidly growing experimental tool box.*  
S. Ciampi, N. Darwish, H. M. Aitken, I. Díez-Pérez, M. L. Coote.  
**Chem. Soc. Rev.** 47 (2018) 5146-5164.
29. *Enabling generalized coordination numbers to describe strain effects.*  
F. Calle-Vallejo, A. S. Bandarenka.  
**ChemSusChem** 11 (2018) 1824-1828.
30. *Two-dimensional silicon carbide structure under uniaxial strains, electronic and bonding analysis.*  
S. Belarouci, T. Ouahrani, N. Benabdallah, Á. Morales-García, I. Belabbas.  
**Comput. Mater. Sci.** 151 (2018) 288-295.
31. *(BEDT-TTF)<sub>2</sub>Cu<sub>2</sub>(CN)<sub>3</sub> spin liquid: beyond the average structure.*  
P. Foury-Leylekian, V. Ilakovac, V. Balédent, P. Fertey, A. Arakcheeva, O. Milat, D. Petermann, G. Guillier, K. Miyagawa, K. Kanoda, P. Alemany, E. Canadell, S. Tomic, J. P. Pouget.  
**Crystals** 8 (2018) 158.
32. *Indirect effect of hydrogen bonds on the magnetic coupling on Mn(III) dinuclear compounds.*  
J. M. Pagès, L. Escriche-Tur, M. Font-Bardia, G. Aullón, M. Corbella.  
**Cryst. Eng. Comm.** 20 (2018) 6629-6639.
33. *Noncovalent interactions in succinic and maleic anhydride derivatives.*  
J. Echeverria.  
**Cryst. Growth Des.** 18 (2018) 506-512.
34. *Does the breaking of adsorption-energy scaling relations guarantee enhanced electrocatalysis?*  
N. Govindarajan, J. M. García-Lastra, E. J. Meijer, F. Calle-Vallejo.  
**Curr. Opin. Electrochem.** 8 (2018) 110-117.
35. *A brief review of the computational modeling of CO<sub>2</sub> electroreduction on Cu electrodes.*  
A. Rendón-Calle, S. Builes, F. Calle-Vallejo.  
**Curr. Opin. Electrochem.** 9 (2018) 158-165.

36. *Slow relaxation of magnetization in a bis-mer-tridentate octahedral Co(II) complex.*  
D. Sertphon, K. S. Murray, W. Phonsri, J. Jover, E. Ruiz, S. G. Telfer, A. Alkas, P. Harding, D. J. Harding.  
**Dalton Trans.** 47 (2018) 859-867.
37. *A 2D rhomboidal system of Mn(II)  $[Mn(3-MeC_6H_4COO)_2(H_2O)_2]_n$  with spin canting: rationalization of the magnetic exchange.*  
B. García-Cirera, R. Costa, I. De P. R. Moreira, M. Font-Bardia, M. Corbella.  
**Dalton Trans.** 47 (2018) 3717-3724.
38. *Evaluation of novel platinum(II) based AIE compound-encapsulated mesoporous silica nanoparticles for cancer theranostic application.*  
S. Saleem Pasha, L. Fageria, C. Climent, N. P. Rath, P. Alemany, R. Chowdhury, A. Roy, I. R. Laskar.  
**Dalton Trans.** 47 (2018) 4613-4624.
39. *Easily reduced bis-pincer  $(NS_2)_2$ molybdenum(IV) to  $(NHS_2)_2$ Mo(II) by alcohols vs. redox-inert  $(NS_2)(NHS_2)$ iron(III) complexes.*  
E. Robles-Marin, A. Mondragón, P. R. Martínez-Alanis, G. Aullón, M. Flores-Alamo, I. Castillo.  
**Dalton Trans.** 47 (2018) 10932-10940.
40. *Pre-selection and assessment of green organic solvents by clustering chemometric tools.*  
M. Tobiszewski, M. Nedyalkova, S. Madurga, F. Pena-Pereira, J. Namieinik, V. Simeonov.  
**Ecotox. Environ. Safe.** 147 (2018) 292-298.
41. *Interconversions of nitrogen-containing species on Pt(100) and Pt(111) electrodes in acidic solutions containing nitrate.*  
I. Katsounaros, M. C. Figueiredo, X. Chen, F. Calle-Vallejo, M. T. M. Koper.  
**Electrochim. Acta.** 271 (2018) 77-83.
42. *H-mediated magnetic interactions between layers in a 2D Mn<sup>II</sup>-dicyanamide polymer: neutron diffraction, DFT, and quantum Monte Carlo calculations.*  
B. Gillon, A. Hammerschmied, A. Gukasov, A. Cousson, T. Cauchy, E. Ruiz, J. A. Schlueter, J. L. Manson.  
**Eur. J. Inorg. Chem.** (2018) 278-288.
43. *Antiferromagnetic interactions in Copper(II)  $\mu$ -oxalato dinuclear complexes: the role of the counterion.*  
M. Julve, A. Gleizes, L. M. Chamoreau, E. Ruiz, M. Verdager.  
**Eur. J. Inorg. Chem.** (2018) 509-516.

44. *Substituted tetrahydroisoquinolines: synthesis, characterization, antitumor activity and other biological properties.*  
S. Capilla, R. Soucek, L. Grau, M. Romero, J. Rubio-Martínez, D. H. Caignard, M. D. Pujol.  
**Eur. J. Med. Chem.** 145 (2018) 51-63.
45. *First homology model of plasmodium falciparum glucose-6-phosphate dehydrogenase: discovery of selective substrate analog-based inhibitors as novel antimalarial agents.*  
N. Alencar, I. Sola, M. Linares, J. Juárez-Jiménez, C. Pont, A. Viayna, D. Vílchez, C. Sampedro, P. Abad, S. Pérez-Benavente, J. Lameira, J. M. Bautista, D. Muñoz-Torrero, F. J. Luque.  
**Eur. J. Med. Chem.** 146 (2018) 108-122.
46. *Aromaticity determines the relative stability of kinked vs. straight topologies in polycyclic aromatic hydrocarbons.*  
J. Poater, M. Duran, M. Solà.  
**Front. Chem.** 6 (2018) 561.
47. *A multistep docking and scoring protocol for congeneric series: implementation on kinase DFG-out type II inhibitors.*  
J. M. Granadino-Roldán, A. Garzón, P. Gomez-Gutierrez, I. Pasamontes-Funez, M. S. Tomas, J. Rubio-Martínez.  
**Future Med. Chem.** 10 (2018) 297-318.
48. *Electronic and steric control of the spin-crossover behavior in (Cp<sup>R</sup>)<sub>2</sub>Mn manganocenes.*  
J. Cirera, E. Ruiz.  
**Inorg. Chem.** 57 (2018) 702-709.
49. *Designing a Dy<sub>2</sub> single-molecule magnet with two well differentiated relaxation processes by using a nonsymmetric bisbidentate bipyrimidine-N-oxide ligand: a comparison with mononuclear counterparts.*  
F. Diaz-Ortega, J. M. Herrera, D. Aravena, E. Ruiz, T. Gupta, G. Rajaraman, H. Nojiri, E. Colacio.  
**Inorg. Chem.** 57 (2018) 6362-6375.
50. *Effect of heteroatoms on field-induced slow magnetic relaxation of mononuclear Fe<sup>III</sup> (S=5/2) ions within polyoxometalates.*  
T. Minato, D. Aravena, E. Ruiz, K. Yamaguchi, N. Mizuno, K. Suzuki.  
**Inorg. Chem.** 57 (2018) 6957-6964.
51. *Covalent and ionic capacity of MOFs to sorb small gas molecules.*  
J. Poater, M. Gimferrer, A. Poater.  
**Inorg. Chem.** 57 (2018) 6981-6990.

52. *Kineticomechanistic study of the redox pH cycling processes occurring on a robust water-soluble cyanido-bridged mixed-valence  $\{Co^{III}/Fe^{II}\}_2$  square.*  
L. Alcázar, P. V. Bernhardt, M. Ferrer, M. Font-Bardia, A. Gallen, J. Jover, M. Martínez, J. Peters, T. J. Zerk.  
**Inorg. Chem.** 57 (2018) 8465-8475.
53. *Element-selective molecular charge transport characteristics of binuclear copper(II)-lanthanide(III) complexes.*  
S. Schmitz, A. Kovalchuk, A. Martín-Rodríguez, J. van Leusen, N. V. Izarova, S. D. M. Bourone, Y. Ai, E. Ruiz, R. C. Chiechi, P. Kogerler, K. Y. Monakhov.  
**Inorg. Chem.** 57 (2018) 9274-9285.
54. *Mononuclear lanthanide complexes with 18-crown-6 ether: synthesis, characterization, magnetic properties, and theoretical studies.*  
L. Maxwell, M. Amoza, E. Ruiz.  
**Inorg. Chem.** 57 (2018) 13225-13234.
55. *Benchmarking density functional methods for calculation of state energies of first row spin-crossover molecules.*  
J. Cirera, M. Via-Nadal, E. Ruiz.  
**Inorg. Chem.** 57 (2018) 14097-14105.
56. *Zero- and mono-coordinate transition metals in crystal structures: a box full of surprises.*  
S. Alvarez.  
**Inorg. Chim. Acta** 470 (2018) 74-81.
57. *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. Quantum Chem.** 118 (2018) e25518.
58. *Mechanochemistry on the Müller-Brown surface.*  
W. Quapp, J. M. Bofill  
**Int. J. Quantum Chem.** 118 (2018) e25522.
59. *Toward a theory of mechanochemistry: simple models from the very beginnings.*  
W. Quapp, J.M. Bofill, J. Ribas-Arino.  
**Int. J. Quantum Chem.** 118 (2018) e25775.
60. *Three-body molecular states of the  $LiH_2^+$  system in the Born-Oppenheimer approximation.*  
E. J. Randazzo, A. Aguilar-Navarro.  
**Int. J. Quantum Chem.** 118 (2018) e25611.

61. *Control over near-ballistic electron transport through formation of parallel pathways in a single-molecule wire.*  
A. C Aragonès, N. Darwish, S. Ciampi, L. Jiang, R. Roesch, E. Ruiz, C. A. Nijhuis, I. Díez-Pérez.  
**J. Am. Chem. Soc.** 141 (2018) 240-250.
62. *Conducting anilate-based mixed-valence Fe(II)Fe(III) coordination polymer: small-polaron hopping model for oxalate-type Fe(II)Fe(III) 2D networks.*  
S. Sahadevan, A. Abhervé, N. Monni, C. Sáenz de Pipaón, J. R. Galan-Mascaros, J. Waerenborgh, B. Vieira, P. Auban-Senzier, S. Pillet, E. Bendeif, P. Alemany, E. Canadell, M.L. Mercuri, N. Avarvari.  
**J. Am. Chem. Soc.** 140 (2018) 12611-12621.
63. *Molecular-scale ligand effects in small gold-thiolate nanoclusters.*  
D. M. Chevrier, L. Raich, C. Rovira, A. Das, Z. Luo, Q. Yao, A. Chatt, J. Xie, R. Jin, J. Akola, P. Zhang.  
**J. Am. Chem. Soc.** 140 (2018) 15430-15436.
64. *On the mechanism of the electrochemical conversion of ammonia to dinitrogen on Pt(100) in alkaline environment.*  
I. Katsounaros, M. C. Figueiredo, X. Chen, F. Calle-Vallejo, H. Li, A. A. Gewirth, N. M. Markovic, M. T. M. Koper.  
**J. Catal.** 359 (2018) 82-91.
65. *Thermal stability of globins: implications of flexibility and heme coordination studied by molecular dynamics simulations.*  
L. Julió Plana, A. Nadra, D. Estrin, F. J. Luque, L. Capece.  
**J. Chem. Inf. Model.** 59 (2018) 441-452.
66. *Development and validation of molecular overlays derived from 3D hydrophobic similarity with PharmScreen.*  
J. Vázquez, A. Deplano, A. Herrero, T. Ginex, E. Gibert, O. Rabal, J. Oyarzabal, E. Herrero, F. J. Luque.  
**J. Chem. Inf. Model.** 24 (2018) 1596-1609.
67. *Jacob's ladder as sketched by Escher: assessing the performance of broadly-used density functionals on transition metal surface properties.*  
L. Vega, J. Ruvireta, F. Viñes, F. Illas.  
**J. Chem. Theory Comput.** 14 (2018) 395-403.
68. *Assessing GW approaches for predicting core level binding energies.*  
M. J. Van Setten, R. Costa, F. Viñes, F. Illas.  
**J. Chem. Theory Comput.**, 14 (2018) 877-883.

69. *Density-dependent formulation of dispersion–repulsion interactions in hybrid multiscale quantum/molecular mechanics (QM/MM) models.*  
C. Curutchet, L. Cupellini, J. Kongsted, S. Corni, L. Frediani, A. H. Steindal, C. A. Guido, G. Scalmani, B. Mennucci.  
**J. Chem. Theory Comput.** 14 (2018) 1671-1681.
70. *Theoretical modeling of electronic excitations of gas-phase and solvated TiO<sub>2</sub> nanoclusters and nanoparticles of interest in photocatalysis.*  
R. Valero, Á. Morales-García, F. Illas.  
**J. Chem. Theory Comput.** 14 (2018) 4391-4404.
71. *Electronic and structural properties of Li<sub>n</sub>@Be<sub>2</sub>B<sub>8</sub> (n=1-14) and Li<sub>n</sub>@Be<sub>2</sub>B<sub>36</sub> (n=1-21) nanoflakes shed light on possible anode materials for Li based batteries.*  
M. Goodarzi, F. Nazari, F. Illas.  
**J. Comput. Chem.** 39 (2018) 1795-1805.
72. *Rational design of near-infrared absorbing organic dyes: controlling the HOMO-LUMO gap using quantitative molecular orbital theory.*  
A. K. Narsaria, J. Poater, C. Fonseca-Guerra, A. W. Ehlers, K. Lammertsma, F. M. Bickelhaupt.  
**J. Comput. Chem.** 39 (2018) 2690-2696.
73. *Shapes of undecanuclear clusters and undecacoordinated metal complexes.*  
S. Alvarez.  
**J. Coord. Chem.** 71 (2018) 590-600.
74. *CO<sub>2</sub> abatement by two-dimensional MXene carbides.*  
Á. Morales-García, A. Fernández-Fernández, F. Viñes, F. Illas.  
**J. Mater. Chem. A** 6 (2018) 3381-3385.
75. *Pressure-induced chemistry for the 2D to 3D transformation of zeolites.*  
M. Mazur, Á. M. Arévalo-López, P. S. Wheatley, G. P. Bignami, S. E. Ashbrook, Á. Morales-García, P. Nachtigall, J. P. Attfield, J. Cejka, R. E. Morris.  
**J. Mater. Chem. A** 6 (2018) 5255-5259.
76. *Visible and near-infrared organic photosensitizers comprising isoindigo derivatives as chromophores: synthesis, optoelectronic properties and factors limiting their efficiency in dye solar cells.*  
C. Aumaitre, C. Rodríguez-Seco, J. Jover, O. Bardagot, F. Caffy, Y. Kervella, N. López, E. Palomares, R. Demadrille.  
**J. Mater. Chem. A** 6 (2018) 10074-10084.
77. *Influence of texture on the electrical properties of Al-doped ZnO films prepared by ultrasonic spray pyrolysis.*  
J. A. Barón-Miranda, O. Calzadilla, S. San-Juan-Hernández, I. Diez-Pérez, J. Díaz, F. Sanz, F. F. Chále-Lara, F. J. Espinosa-Faller, F. Caballero-Briones.  
**J. Mater. Sci-Mater. El.** 29 (2018) 2016-2025.

78. *Aniline-based inhibitors of influenza H1N1 virus acting on hemagglutinin-mediated fusion.*  
R. Leiva, M. Barniol-Xicota, S. Codony, T. Ginex, E. Vanderlinden, M. Montes, M. Caffrey, F. J. Luque, L. Naesens, S. Vázquez.  
**J. Med. Chem.** 61 (2018) 98-118.
79. *Redesigning the coumarin scaffold into small bright fluorophores with far-red to NIR emission and large Stokes' shifts useful for cell imaging.*  
A. Gandioso, R. Bresolí-Obach, A. Nin-Hill, M. Bosch, M. Palau, A. Galindo, S. Contreras, C. Rovira, S. Nonell, V. Marchán.  
**J. Org. Chem.** 3 (2018) 1185-1195.
80. *Generation and reactions of an octacyclic hindered pyramidalized alkene.*  
T. Ginex, P. Camps, D. Lozano, C. Barbaraci, M. Font-Bardia, F. J. Luque, C. Estarellas.  
**J. Org. Chem.** 83 (2018) 5420-5430.
81. *A definition of the magnetic transition temperature using valence bond theory.*  
J. Jornet-Somoza, M. Deumal, J. Borge, M. A. Robb.  
**J. Phys. Chem. A** 122 (2018) 2168-2177.
82. *Post-B3LYP functionals do not improve the description of magnetic coupling in Cu(II) dinuclear complexes.*  
R. Costa, D. Reta, I. De P. R. Moreira, F. Illas.  
**J. Phys. Chem. A** 122 (2018) 3423-3432.
83. *Matildite contact with media: first-principles study of AgBiS<sub>2</sub> surfaces and nanoparticle morphology.*  
F. Viñes, G. Konstantatos, F. Illas.  
**J. Phys. Chem. B** 122 (2018) 521-526.
84. *DFT-based adsorption isotherms for pure and flue gas mixtures on Mg-MOF-74. Application in CO<sub>2</sub> capture swing adsorption processes.*  
G. Alonso, D. Bahamon, F. Keshavarz, X. Giménez, P. Gamallo, R. Sayós.  
**J. Phys. Chem. C** 122 (2018) 3945-3957.
85. *Properties of single oxygen vacancies on a realistic (TiO<sub>2</sub>)<sub>84</sub> nanoparticle: a challenge for density functionals.*  
Á. Morales-García, O. Lamiel-García, R. Valero, F. Illas.  
**J. Phys. Chem. C** 122 (2018) 2413-2421.
86. *Understanding W doping in wurtzite ZnO.*  
F. Viñes, A. Iglesias-Juez, M. Fernández-García, F. Illas.  
**J. Phys. Chem. C** 122 (2018) 19082-19089.
87. *Assessing the performance of Cobalt-phthalocyanine nanoflakes as molecular catalysts for Li-promoted oxalate formation in Li-CO<sub>2</sub>-oxalate batteries.*  
M. Goodarzi, F. Nazari, F. Illas.  
**J. Phys. Chem. C** 122 (2018) 25776-25784.

88. *Diversity of adsorbed hydrogen on the TiC(001) surface at high coverages.*  
P. J. Ramirez, S. T. Bromley, F. Illas, F. Viñes, J. A Rodríguez.  
**J. Phys. Chem. C** 122 (2018) 28013-28020.
89. *Combining theory and experiment for multitechnique characterization of activated CO<sub>2</sub> on transition metal carbide (001) surfaces.*  
C. Kunkel, F. Viñes, P. J. Ramirez, J. A. Rodriguez, F. Illas.  
**J. Phys. Chem. C** (2018) doi: 10.1021/acs.jpcc.7b12227
90. *Surface activity of early transition metal oxycarbides: CO<sub>2</sub> adsorption case study.*  
C. Kunkel, F. Viñes, F. Illas.  
**J. Phys. Chem. C** (2018) doi: 10.1021/acs.jpcc.8b11942
91. *Oxygen reduction reaction: rapid prediction of mass activity of nanostructured platinum electrocatalysts.*  
M. Rück, A. Bandarenka, F. Calle-Vallejo, A. Gagliardi.  
**J. Phys. Chem. Lett.** 9 (2018) 4463-4468.
92. *Electronic, bonding, linear, and nonlinear optical properties of Na<sub>2</sub>MGe<sub>2</sub>Q<sub>6</sub> (M=Cd, Zn, Hg; Q=S, Se), Na<sub>2</sub>ZnSi<sub>2</sub>S<sub>6</sub>, and Na<sub>2</sub>ZnSn<sub>2</sub>S<sub>6</sub> two metal-mixed chalcogenide compounds.*  
R. Mahiaoui, T. Ouahrani, A. Chikhaoui, Á. Morales-García, A. H. Reshak.  
**J. Phys. Chem. Solids** 119 (2018) 220-227.
93. *Role of lattice oxygen content and Ni geometry in the oxygen evolution activity of the Ba-Ni-O system.*  
M. Retuerto, F. Calle-Vallejo, L. Pascual, P. Ferrer, Á. García, J. Torrero, D. Gianolio, J. L. G. Fierro, M. A. Peña, J. A. Alonso, S. Rojas.  
**J. Power Sources** 404 (2018) 56-63.
94. *Donor-anion interactions in quarter-filled low-dimensional organic conductors.*  
J. P. Pouget, P. Alemany, E. Canadell.  
**Mater. Horiz.** 5 (2018) 590-640.
95. *Breakthroughs in medicinal chemistry: new targets and mechanisms, new drugs, new hopes-2.*  
D. Muñoz-Torrero, A. A. Mangoni, H. Liu, C. Hulme, J. Rautio, R. Karaman, M. E. de Sousa, K. Prokai-Tatrai, J.-M. Sabatier, C. Siciliano, F. J. Luque, G. Kokotos, R. Ragno, S. Collina, C. Guillou, M. Gütschow, L. A. Agrofolio.  
**Molecules** 65 (2018) 1-9.
96. *Newton trajectories for the tilted Frenkel-Kontorova model.*  
W. Quapp, J. M. Bofill.  
**Mol. Phys.** (2018) doi: 10.1080/00268976.2019.1576930
97. *Stability of mixed-oxide titanosilicates: dependency on size and composition from nanocluster to bulk.*  
A. Cuko A, M. Calatayud, S. T. Bromley.  
**Nanoscale** 10 (2018) 832-842.



98. *Properties of hydrated TiO<sub>2</sub> and SiO<sub>2</sub> nanoclusters: dependence on size, temperature and water vapour pressure.*  
A. Cuko, A. M. Escatllar, M. Calatayud, S. T. Bromley.  
**Nanoscale** 10 (2018) 21518-21532.
99. *Long distance electron transfer through the aqueous solution between redox partner proteins.*  
A. Lagunas, A. Guerra-Castellano, A. Nin-Hill, I. Díaz-Moreno, M. A. de la Rosa, J. Samitier, C. Rovira, P. Gorostiza.  
**Nat. Commun.** 9 (2018) 5157-5163.
100. *Palladium-mediated enzyme activation suggests multiphase initiation of glycogenesis.*  
M. K. Bilyard, H. Bailey, L. Raich, M. Gafitescu, T. Machida, J. Iglesias-Fernández, S. S. Lee, C. D. Spicer, C. Rovira, W. W. Yue, B. G. Davis.  
**Nature** 563 (2018) 235-240.
101. *The role of metal/oxide interfaces for long-range metal particle activation during CO oxidation.*  
Y. Suchorski, S. M. Kozlov, I. Bernal, M. Datler, D. Vogel, Z. Budinska, K. M. Neyman, G. Rupprechter.  
**Nature Mater.** 17 (2018) 519-522.
102. *Structure, magnetic properties and DFT calculations of azido-copper(II) complexes with different azido-bonding, nuclearity and dimensionality.*  
S. S. Massoud, M. M. Henary, L. Maxwell, A. Martín, E. Ruiz, R. Vicente, R. C. Fischer, F. A. Mautner.  
**New J. Chem.** 42 (2018) 2627-2639.
103. *Els plastòmers.*  
O. Güell, F. Mas.  
**Notícies per a Químics** 479 (2018) 16-19.
104. *El carbonat de calci: molt més que un filler.*  
O. Güell, F. Mas.  
**Notícies per a Químics** 478 (2018) 21-26.
105. *Zn(II) byproduct enhances the Cu-catalyzed cross-coupling of bromozinc. Difluorophosphonate with iodobenzoates: A DFT Study.*  
J. Jover.  
**Organometallics** 37 (2018) 327-336.
106. *Role of ring ortho substituents on the configuration of carotenoid polyene chains.*  
M. Kim, H. Jung, A. C. Aragonès, I. Díez-Pérez, K.-H. Ahn, W.-J. Chung, D. Kim, S. Koo.  
**Org. Lett.** 20 (2018) 493-496.
107. *Quantum-mechanical simulations of pressure effects on MgIn<sub>2</sub>S<sub>4</sub> polymorphs.*  
S. Belarouci, T. Ouahrani, N. Benabdallah, Á. Morales-García, R. Franco.  
**Phase Transit.** 91 (2018) 759-771.

108. *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.** 20 (2018) 118.
109. *Theoretical evidence for the direct <sup>3</sup>MLCT-HS deactivation in the light-induced spin crossover of Fe(II)- polypyridyl complexes.*  
C. Sousa, M. Llunell, A. Domingo, C. de Graaf.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 20 (2018) 2351-2355.
110. *On the H<sub>2</sub> interaction on transition metal adatoms supported on graphene: a systematic density functional theory.*  
M. Manadé, F. Viñes, A. Gil, F. Illas.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 20 (2018) 3819-3823.
111. *Triarylmethyl-based 2D covalent networks: virtual screening of chemical functionalisation for optimising strain-induced property control.*  
I. Alcon, S. T. Bromley.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 20 (2018) 5028-5035.
112. *The reactivity of the cyclopropyl cyanide in Titan's atmosphere: a possible pre-biotic mechanism.*  
E. López, D. Ascenzi, P. Tosi, J. M. Bofill, J. de Andrés, M. Albertí, J. M. Lucas, A. Aguilar.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 20 (2018) 6198-6210.
113. *On the prediction of core level binding energies in molecules, surfaces and solids.*  
F. Viñes, C. Sousa, F. Illas.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 20 (2018) 8403-8410.
114. *Two-dimensional nitrides as highly efficient potential candidates for CO<sub>2</sub> capture and activation.*  
R. Morales-Salvador, Á. Morales-García, F. Viñes, F. Illas.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 20 (2018) 17117-17124.
115. *Reliable and computationally affordable prediction of the energy gap of (TiO<sub>2</sub>)<sub>n</sub> (10 ≤ n ≤ 563) nanoparticles from density functional theory.*  
Á. Morales-García, R. Valero, F. Illas.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 20 (2018) 18907-18911.
116. *The magnetic fingerprint of dithiazolyl-based molecule magnets.*  
T. Francese, J. Ribas-Arino, J. J. Novoa, R. W. A. Havenith, R. Broer, C. de Graaf, M. Deumal.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 20 (2018) 20406-20416.
117. *CO<sub>2</sub> interaction with violarite (FeNi<sub>2</sub>S<sub>4</sub>) surfaces: a dispersion-corrected DFT study.*  
S. Posada-Pérez, D. Santos-Carballal, U. Terranova, A. Roldan, F. Illas, N. H. De Leeuw.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 20 (2018) 20439-20446.

118. *Robustness of surface activity electronic-structure based descriptors of transition metals.*  
L. Vega, B. Martínez, F. Viñes, F. Illas.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 20 (2018) 20548-20554.
119. *Determination of the protonation preferences of bilin pigments in cryptophyte antenna complexes.*  
M. Corbella, Z. S. D. Toa, G. D. Scholes, F. J. Luque, C. Curutchet.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 20 (2018) 21404-21416.
120. *Tuning transition metal carbides activity by surface metal alloying: case study on CO<sub>2</sub> capture and activation.*  
M. López, L. Broderick, J. J. Carey, F. Viñes, M. Nolan, F. Illas.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 20 (2018) 22179-22186.
121. *How abasic sites impact hole transfer dynamics in GC-rich DNA sequences.*  
M. Corbella, A. A. Voityuk, C. Curutchet.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 20 (2018) 23123-23131.
122. *Tropospheric oxidation of methyl hydrotrioxide (CH<sub>3</sub>OOOH) by hydroxyl radical.*  
J. M. Anglada, A. Solé.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 20 (2018) 27406-27417.
123. *Quantum-classical dynamics of the capture of neon atoms by superfluid helium nanodroplets.*  
M. Blancafort-Jorquera, A. Vilà, M. González.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 20 (2018) 29737.
124. *Ab initio electronic structure calculations of entire blue copper azurins.*  
C. Romero-Muñiz, M. Ortega, J. G. Vilhena, I Díez-Pérez, J. C. Cuevas, R. Pérez, L. A. Zotti.  
**Phys. Chem. Chem. Phys.** 20 (2018) 30392-30402.
125. *Modeling and subtleties of K-Ras and calmodulin interaction.*  
E. Garrido, J. Lázaro, M. Jaumot, N. Agell, J. Rubio-Martinez.  
**PLoS Comput. Biol.** 14 (2018) e1006552.
126. *Coupling of charge regulation and conformational equilibria in linear weak polyelectrolytes: treatment of long range via effective short-ranged and pH-dependent interaction parameters.*  
P. M. Blanco, S. Madurga, F. Mas, J. L. Garcés.  
**Polymers** 10 (2018) 811.
127. *Coupling of charge regulation and conformational equilibria in linear weak polyelectrolytes: treatment of long range via effective short-ranged and pH-dependent interaction parameters.*  
P. M. Blanco, S. Madurga, F. Mas, J. L. Garcés.  
**Polymers** 10 (2018) 811.

128. *SABER 2.0 a CTEM. Correcció recompensada i continguts – Estratègies pràctiques d'aprenentatge actiu.*  
L. Arévalo, P. Gamallo, X. Giménez.  
**REIRE 11** (2018) 84 doi:10.1344/reire2018.11.220911
129. *Estructura electrònica i propietats de sistemes multifuncionals: materials derivats del bisditiazolil.*  
C. Roncero, M. Deumal, J. Ribas, I. de P. R. Moreira.  
**Revista de la Societat Catalana de Química 17** (2018) 86-95.
130. *Structure and reducibility of doped by yttrium cerium dioxide nanoparticles and (111) surface.*  
H. A. Aleksandrov, I. Z. Koleva, K. M. Neyman, T. Tabakova, G. N. Vayssilov.  
**RSC Adv. 8** (2018) 33728-33741.
131. *Solvation-guided design of fluorescent probes for discrimination of amyloids.*  
K. J. Cao, K. M. Elbel, J. L. Cifelli, J. Cirera, C. J. Sigurdson, F. Paesani, E. A. Theodorakis, J. Yang.  
**Sci. Rep. 8** (2018) 6950.
132. *Electrostatic tuning of the ligand binding mechanism by Glu27 in nitrophorin 7.*  
S. Abbruzzetti, A. Allegri, A. Bidon-Chanal, H. Ogata, G. Soavi, G. Cerullo, S. Bruno, C. Montali, F. J. Luque, C. Viappiani.  
**Sci. Rep. 8** (2018) 10855.
133. *Macromolecular diffusion in crowded media beyond the hard-sphere model.*  
P. M. Blanco, J. L. Garcés, S. Madurga, F. Mas.  
**Soft Matter 14** (2018) 3105-3114.
134. *Exploring potential energy surfaces with gentlest ascent dynamics in combination with the shrinking dimer method and Newtonian dynamics.*  
G. Albareda, J. M. Bofill, I. de P. R. Moreira, W. Quapp, J. Rubio-Martínez.  
**Theor. Chem. Acc. 137** (2018) 73.
135. *How Au outperforms Pt in the catalytic reduction of methane towards ethane and molecular hydrogen.*  
J. I. Martínez, F. Calle-Vallejo, P. L. De Andrés.  
**Top. Catal. 61** (2018) 1290-1299.
136. *Electronic energy transfer in biomacromolecules.*  
L. Cupellini, M. Corbella, B. Mennucci, C. Curutchet.  
**WIREs Comput. Mol. Sci.** (2018) doi:10.1002/wcms.1392

CAPÍTOLS DE LLIBRES I PROCEEDINGS

1. *Oxygen evolution reaction catalyzed by cost-effective metal oxides.*  
O. Díaz-Morales, F. Calle-Vallejo.  
**Encyclopedia of Interfacial Chemistry** edited by K. Wandelt (Elsevier, The Netherlands) 2018.
2. *Modeling realistic titania nanoparticles.*  
K. C. Ko, J. Y. Lee, F. Illas.  
**Frontiers of Nanoscience, Computational Modelling of Nanoparticles** edited by S. T. Bromley and S. M. Woodley (Elsevier, The Netherlands) 2018.
3. *Simulating heterogeneous catalysis on metallic nanoparticles: from under-coordinated sites to extended facets.*  
F. Viñes.  
**Frontiers of Nanoscience, Computational Modelling of Nanoparticles** edited by S. T. Bromley & S. M. Woodley (Elsevier, The Netherlands) 2018.
4. *Plastics and biodegradation: what is a bioplastic?*  
O. Güell, F. Mas.  
**Hands-on Science. Advancing Science. Improving Education** (The Hand-on Science Network, Portugal) p. 306-308, 2018.
5. *Pt-CeO<sub>2</sub> catalysts for fuel cell applications: from surface science to electrochemistry.*  
Y. Lykhach, O. Brummel, A. Bruix, S. Fabris, I. Matolínová, V. Matolín, K. M. Neyman, J. Libuda.  
**Encyclopedia of Interfacial Chemistry: Surface Science and Electrochemistry, vol. 2**, p. 189-201, edited by K. Wandelt (Elsevier, Oxford) 2018.
6. *Electron transport through peptides and blue-Copper azurins*  
L. A. Zotti, M. P. Ruiz, A. C. Aragonés, N. Camarero, J. G. Vilhena, M. Ortega, R. Perez, J. C. Cuevas, P. Gorostiza, I. Diéz-Pérez.  
**APS Meeting Abstracts** edited by APS (Bulletin of the American Physical Society, USA) 2018.
7. *Chlorophylls in a protein environment: How to calculate their spectral and redox properties (from MO to DFT).*  
C. Curutchet, B. Mennucci  
**Light Harvesting in Photosynthesis** edited by R. Croce, R. van Grondelle, H. van Amerongen and I. van Stokkum (CRC Press - Taylor and Francis Group, USA) 2018.
8. *On the use of quantum mechanical solvation continuum models in drug design: IEF/PCM-MST hydrophobic descriptors in 3D-QSAR analysis of AMPA inhibitors.*  
T. Ginex, E. Herrero, E. Gibert, F. J. Luque.  
**Theoretical and Quantum Chemistry at the Dawn's End of 21st Century**, edited by T. Chakraborty, R. Carbó-Dorca (Apple Academic Press, USA) 2018.

9. *Effect of the solvent on the conformational behavior of the alanine dipeptide in explicit solvent simulations.*  
J. Rubio-Martínez, J. J. Perez.  
**Theoretical and Quantum Chemistry at the Dawn's End of 21st Century**, edited by T. Chakraborty, R. Carbó-Dorca (Apple Academic Press, USA) 2018.
10. **Computational Modelling of Nanoparticles**, Vol 12. *Frontiers of Nanoscience*, edited by S. T. Bromley and S. M. Woodley (Elsevier, UK) 2018.

### III.3 ALTRES ACTIVITATS

#### TESIS DOCTORALS 2018

---

1. *Electroreduction of Nitrate and Carbon Dioxide on Copper Electrodes.*  
**Elena Pérez-Gallent**  
Leiden Institute of Chemistry, Leiden University.  
Febrer 2018.
2. *Heterogeneous Catalysis of Green Chemistry Reactions on Molybdenum Carbide Based Catalysts.*  
**Sergio Posada Pérez**  
Director/s: F. Illas i F. Viñes  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Març 2018.
3. *Rational Chemical Design of Triarylmethyl-Based Devices and 2D Materials.*  
**Isaac Alcón Rovira**  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Març 2018.
4. *Quantum Confinement of Gaseous Molecules in Nanostructures: Effects on the Dynamics and Internal Structure.*  
**Manel Mondelo Martell**  
Programa de Doctorat de Nanociències.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juny 2018.
5. *Simulación molecular aplicada a inhibidores de 11 $\beta$ hidroxiesteroide deshidrogenasa tipo 1 y efecto de temperatura en Citoglobina.*  
**Constantí Seira Castan**  
Programa de doctorat en Recerca, Desenvolupament i Control de Medicaments.  
Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2018.
6. *Modelització multiescala del paper de l'entorn en processos de transferència de càrrega i d'energia en biomolècules.*  
**Marina Corbella Morató**  
Programa de Doctorat en Recerca, Desenvolupament i Control de Medicaments.  
Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2018.

7. *Unveiling protein-substrate interactions and conformations that influence catalysis in carbohydrate-active enzymes.*  
**Lluís Raich Armendáriz**  
Química Teòrica i Modelització Computacional  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2018.
8. *Modelling Nano-oxide Materials with Technolgical and Environmental Relevance: Silica, Titania and Titanosilicates.*  
**Andi Cuko**  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Setembre 2018.
9. *Cathodic Corrosion.*  
**Thomas J. P. Hersbach**  
Leiden Institute of Chemistry, Leiden University.  
Decembre 2018.

## MÀSTERS 2018

---

1. *Contribution to the Study of Methyl Acetate Transesterification by Reactive Pressure-Swing Distillation.*  
**Alvaro Risco Morillo**  
Màster en Enginyeria Química.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Febrer 2018.
2. *Effect of the chemical environment on redox single-molecule contacts.*  
**Mrug Upadhyay**  
King's College London.  
Abril 2018.
3. *A Molecular Dynamics investigation of Lipooligosaccharide  $\alpha$ galactosyltransferase C (LgtC).*  
**Charlotte Madill**  
Màster en Química Teòrica i Modelització Computacional.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juny 2018.
4. *Surrogate model for carbon dioxide equilibrium absorption using aqueous ammonia.*  
**Jesus Garcia Aspano**  
Màster d'Enginyeria Ambiental.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juny 2018.



5. *Surrogate Model For Carbon Dioxide Equilibrium Absorption Using Aqueous Alkanolamines.*  
**Laidy Diana Medina Quinquin**  
Màster d'Enginyeria Ambiental.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juny 2018.
6. *Chimney flue gas immission simulated using ANSYS®.*  
**Yulissa Espil Sánchez**  
Màster en Enginyeria Química.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juny 2018.
7. *Selective allosteric inhibition of the antiapoptotic Bcl-xL and Mcl-1 proteins.*  
**Cristian Privat Contreras**  
Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.  
Facultat de Química. Universitat de Barcelona.  
Juliol 2018.
8. *Studies of Spin Crossover Complexes: Dispersion Effects and Troublesome Cases.*  
**Francisco Alonso Gómez Mudarra**  
Màster en Química de Materiales Aplicada.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2018.
9. *Molecular Determinants in the Interaction between Bak and BH3-only peptides: Towards the Design of Bak Activators.*  
**Guillem Vila Julià**  
Màster en Bioinformatics for Genomic and Drug Design.  
Universitat Autònoma de Barcelona.  
Juliol 2018.
10. *Computational study of tacticity effect on polypropylene structural properties using Rotational Isomeric State model.*  
**Jordi Sans Duñó**  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2018.
11. *Theoretical Modeling of the Spin-crossover Behavior in the [Fe(1H-tetrazole)<sub>6</sub>] Metal-organic Framework.*  
**Mitali Vijaykum Patel**  
Màster en Química de Materials Aplicada.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2018.

12. *Interplay of Carbon on Transition Metal Surfaces and Nanoparticles.*  
**Oriol Piqué Caufapé**  
Director/s: F. Viñes  
Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2018.
  
13. *Computational study of the phase transition in the heterocyclic bis(1,2,3,5-dithiadiazolyl)-4,4'-biphenylene diradical.*  
**Raúl Santiago Piera**  
Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2018.
  
14. *Magnetic transition in Proton Coupled to Electron Transfer PCET anthranol/anthroxyl crystal*  
**Sergio Pablo García Carrillo**  
Màster en Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.  
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.  
Juliol 2018.

## PARTICIPACIÓ A CONGRESSOS 2018

---

### **Seminaris del Departament de Química de la Universitat d'Estrasburg**

Estrasburg (França), 19 Gener 2018

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

J. Ribas

### **Verdaguer Symposium**

Paris (França), 19 Gener 2018

*Chemical Laboratories in Art and Print (conferència convidada)*

S. Alvarez

### **International Workshop on Oxide Surfaces (IWOX-XI)**

Granada (Espanya), 22-26 Gener 2018

*Properties of Realistic Oxide Nanoparticles from Relativistic All Electron Density Functional Theory Based Calculations (conferència convidada)*

F. Illas

### **18º Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica: 'New perspectives in Drug Discovery'**

Salamanca (Espanya), 23-26 Gener 2018

*Molecular dynamics simulations of AMPK mechanism of allosteric regulation by direct activators (comunicació oral)*

C. Estarellas, E. Fara, S. Quesada-Sánchez, A. Castro, F. J. Luque

*Molecular Natural (poly)phenols and Alzheimer's disease: Theoretical elucidation of the structural determinants for covalent amyloid beta (A $\beta$ ) inhibition (comunicación oral)*

T. Ginex, F. J. Luque

### **Desena Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans**

Barcelona (Espanya), 29 Gener 2018

*Difusió en medis d'alta ocupació macromolecular: model més enllà de l'aproximació d'esferes dures (comunicació oral)*

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

**16<sup>th</sup> Iberian Meeting/ 4th ChemBio Group Meeting of the Real Sociedad de Química Española**

Barcelona (Espanya), 5 Febrer 2018

*Catalysis by natural and engineered glycosidases (conferència convidada)*

C. Rovira

**IV Reunión de Jóvenes Investigadores en Coloides e Interfases (JICI-IV)**

Córdoba (Espanya), 8 Febrer 2018

*Modelling polymer stretching: A Statistical Mechanics approach (comunicació oral)*

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

**XX Programa de Promoción de la Cultura Científica y Tecnológica**

Talavera de la Reina (Espanya), 8 Febrer 2018

*Química en la literatura: cosmogonías y química silábica (conferència convidada)*

S. Alvarez

**2018 Workshop on Theoretical Chemistry – Modelling of Environment Effects in Quantum Chemistry**

Mariapfarr (Àustria), 20-23 Febrer 2018

*QM/MM with polarizable embeddings (from ground state to photoinduced processes) (conferència convidada)*

C. Curutchet

**International Workshop on Molecular Architectonics 2018**

Osaka (Japó), 2-3 Març 2018

*Charge Transport in Single-molecule wires (conferència convidada)*

I. Diez-Perez

**XX Programa de Promoción de la Cultura Científica y Tecnológica**

Segòvia (Espanya), 12 Març 2018

*Química en la literatura: cosmogonías y química silábica (conferència convidada)*

S. Alvarez

### **32nd Molecular Modelling Workshop 2018**

Erlangen (Alemanya), 12-14 Març 2018

*Hydrophobic Similarity: Application to Three-Dimensional Molecular Overlays with PharmScreen (comunicació oral)*

J. Vazquez, A. Deplano, A. Herrero, T. Ginex, E. Gibert, O. Rabal, J. Oyarzabal, E. Herrero, F. J. Luque

### **255th American Chemical Society**

Nova Orleans (EEUU), 18-22 Març 2018

*Hydrophobic similarity between molecules: Application to three-dimensional molecular overlays with PharmScreen (comunicació oral)*

J. Vazquez, A. Deplano, A. Herrero, E. Gibert, T. Ginex, O. Rabal, J. Oyarzabal, E. Herrero, F. J. Luque

*Computational modelling of the ligand tuning effect over the Transition Temperature in Spin-Crossover systems using Density Functional Methods (comunicació oral)*

J. Cirera

*Benchmarking Density Functional Methods for Calculation of State Energies of First Row Spin-Crossover Molecules (comunicació oral)*

J. Cirera

*Alkyl groups as electron density donors in  $\pi$ hole bonding (comunicació oral)*

J. Echeverría

*Frustrated Lewis Trios and long-range hole interactions (comunicació oral)*

J. Echeverría

### **Polymers 2018: Design, Function and Application**

Barcelona (Espanya), 21 Març 2018

*Modelling polyelectrolytes: coupling of conformational and ionization equilibria in solution (pòster)*

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

### **H2020 Materials Networking School**

Sofia (Bulgària), 21 Març 2018

*Computer-aided analysis of the structure and stability of B-DNA: towards the design of supramolecular self-assembling materials (conferència convidada)*

J. Poater

*Studying charge transport in Biomolecular Interfaces (conferència convidada)*

I. Diez-Perez

**Predictive Catalysis: Transition-Metal Reactivity by Design (Girona Seminar 2018)**

Girona (Espanya), 3 Abril 2018

*Structure and stability of B-DNA model systems in non-terran bio-solvents (pòster)*

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

**X Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular (J<sup>2</sup>IFAM)**

Barcelona (Espanya), 3-6 Abril 2018

*Compactness and d-band Filling Effect on Chemical Descriptors for Transition Metals (comunicació oral)*

B. Martínez Díaz, L. Vega, F. Viñes

*Post-Combustion CO<sub>2</sub> gas Separation with Zeolites (comunicació oral)*

H. Prats García

*Tuning Activity of Transition Metal Carbides by Surface Metal Alloying: Case of Study of CO<sub>2</sub> Capture (comunicació oral)*

M. López, F. Viñes, F. Illas

*Activation of the CO<sub>2</sub> Molecule on MXenes Nitrides (comunicació oral)*

R. Morales-Salvador, Á. Morales-García, F. Viñes

*SO<sub>2</sub> poisoning effect on the adsorption properties of Mg-MOF-74 (comunicació oral)*

G. Alonso, D. Bahamon, P. Gamallo, R. Sayós

**X Conference of Young Scientists in Atomic and Molecular Physics**

Barcelona (Espanya), 4 Abril 2018

*Diffusion in crowded media: Modelling beyond the hard-sphere approximation (presentació oral)*

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

**22<sup>nd</sup> Topical Meeting of the International Society of Electrochemistry**

Tokyo (Japón), 15-18 Abril 2018

*Optimizing Platinum Electrocatalysts for Various Reactions by Means of Coordination-Activity Plots (comunicació oral)*

F. Calle-Vallejo

**Quantum Frontiers and Fundamentals: Experimental Studies and Theoretical Ramifications**

Bangaluru (India), 30 Abril – 4 Maig 2018

*Non-universality of quantum dynamics computed from time-correlation functions (conferència convidada)*

X. Oriols, G. Albareda, D. Pandey

**Lectures in UAB**

Barcelona (Espanya), 3 Maig 2018

*How Far Quantum Chemical Models Can Go On Predicting Properties of Realistic Semiconducting Oxide Nanoparticles? (seminari convidat)*

F. Illas

**Masterquímica XIV**

Barcelona (Espanya), 9 Maig 2018

*Precisió dels Funcionals de la Densitat en la Descripció de les Propietats Superficials del Metalls de Transició (pòster)*

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

*Estudi computacional de l'efecte de la tacticitat en les propietats conformacionals del polipropilè (pòster)*

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

**Seminarios de la Universidad de Antioquia**

Medellín (Colòmbia), 9 Maig 2018

*Transition Metal Carbides against Global Warming (conferència convidada)*

F. Viñes

**XX Programa de Promoción de la Cultura Científica y Tecnológica**

Madrid (Espanya), 10 Maig 2018

*Química en la literatura: cosmogonías y química silábica (conferència convidada)*

S. Alvarez

**5th International School-Conference on Catalysis for Young Scientists "Catalyst Design: From Molecular to Industrial Level"**

Moscú (Rússia), 20-23 Maig 2018

K. M. Neyman (comité científic)

**11th European School on Molecular Nanoscience (EsMoINa)**

Tenerife (Espanya), 20-25 Maig 2018

*Tunneling Transport in Curcuminoid Systems (conferència convidada)*

E. Ruiz

### **HPC for next generation nanomaterials & nanodevices engineering**

Bellaterra (Espanya), 30-31 Maig 2018

*Computer simulation of biological processes: enzyme catalysis (comunicació keynote)*

C. Rovira

*High Performance Computing for the Understanding of Realistic TiO<sub>2</sub> and ZnO Nanoparticles (pòster)*

Á. Morales-García, O. Lamiel-García, A. Macià-Escatllar, K. C. Ko, R. Valero, F. Viñes, S. T. Bromley, F. Illas

### **IX IQTCUB Symposium**

Barcelona (Espanya), 1 Juny 2018

M. Deumal, J. Cirera (organització, chairmans)

*Understanding the origin of magnetic anisotropy in S=1/2 mononuclear transition metal complexes (conferència invitada)*

M. Amoza

*Electronic structure and properties of multifunctional systems: bisdithiazolyl-based materials (pòster)*

C. Roncero, M. Deumal, I. P. R. Moreira, J. Ribas-Arino

*Computational Design of New Materials for Water Electrolyzers (conferència convidada)*

F. Calle-Vallejo

*On the Accuracy of Density Functionals in Describing Transition Metal Surface Properties (pòster)*

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

*Tuning Activity of Transition Metal Carbides by Surface Metal Alloying: Case of Study CO<sub>2</sub> Capture (pòster)*

M. López, L. Broderick, J. J. Carey, F. Viñes, M. Nolan, F. Illas

*Two-Dimensional Nitrides as Highly Efficient Potential Candidates for CO<sub>2</sub> Capture and Activation (pòster)*

R. Morales-Salvador, Á. Morales-García, F. Viñes, F. Illas

*To what extent do chemical descriptors behave as such? (pòster)*

B. Martínez, L. Vega, F. Viñes

*H<sub>2</sub> dissociation on transition metal carbide surfaces (pòster)*

J. J. Piñero, P. J. Ramírez, S. T. Bromley, F. Illas, F. Viñes, J. A. Rodríguez

*A theoretical approach to the reaction dynamics involving superfluid helium nanodroplets. The production of Ne<sub>2</sub>@(<sup>4</sup>He)<sub>N</sub> from Ne + Ne@(<sup>4</sup>He)<sub>N</sub> (pòster)*

M. Blancafort, A. Vilà, M. González



*Vibrational energy relaxation of diatomics in superfluid helium nanodroplets. Quantum dynamics approach and application to the I<sub>2</sub> molecule (pòster)*

A. Vilà, M. Paniagua, M. González

*Dynamics of the O + D<sub>2</sub><sup>+</sup> → OD<sup>+</sup> + D gas phase reaction. QCT study on the ground PES and comparison with the experiment (pòster)*

P. Gamallo, M. Paniagua, M. González

*Modelling polyelectrolytes: coupling of conformational and ionization equilibria in solution (pòster)*

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

*Estudi computacional de l'efecte de la tacticitat en les propietats conformacionals del polipropilè (pòster)*

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

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

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

### **Non-Adiabatic Quantum Dynamics: From Theory to Experiments**

Lausanne (Suïssa), 2-7 Juny 2018

*Ab-initio nonadiabatic dynamics without Born-Oppenheimer potential-energy surfaces (conferència convidada)*

G. Albareda

### **NoSIC 8 (Not Strictly Inorganic Chemistry)**

Prullans (Espanya), 6-8 Juny 2018

S. Álvarez (chairman)

*Photographers of Chemistry (conferència invitada)*

S. Alvarez

### **Theoretical Studies of Magnetic Systems: Methodological Developments and Applications, Satellite Meeting of 16th International Conference Quantum Chemistry (ICQC)**

Toulouse (França), 13-16 Juny 2018

*Room Temperature Magnetoresistance in Single-Molecule Metalloporphyrin-Based Devices (conferència convidada)*

E. Ruiz

**2nd International Symposium on Single-Atom Catalysis (ISSAC2)**

Pequín (Xina), 15-18 Juny 2018

K. M. Neyman (*chairperson*)

*Progress in density-functional modelling of ceria-based nanomaterials for single-atom catalysis (comunicació keynote)*

K. M. Neyman

**Theormag2018 (International Conference Quantum Chemistry ICQC Satellite)**

Toulouse (França), 18-23 Juny 2018

*On the importance of models for modeling magnetism (comunicació oral)*

M. Deumal

**President's Meeting of the International Society of Quantum Biology and Pharmacology**

Barcelona (Espanya), 19-21 Juny 2018

*Assessing drug-binding through simulations of electronic energy transfer (comunicació oral)*

C. Curutchet

**Photoinduced Processes in Embedded Systems**

Pisa (Itàlia), 24-27 Juny 2018

*Assessing drug-binding through simulations of electronic energy transfer (comunicació oral)*

C. Curutchet

**International Congress of Theoretical Aspects in Catalysis – ICTAC 2018**

Los Ángeles (EUA), 24-28 Juny 2018

*CO<sub>2</sub> Capture & Conversion Using Transition Metal Carbide Systems (comunicació oral)*

F. Viñes, C. Kunkel, Á. Morales-Garcia, F. Illas

**Cancer and Metabolism 2018**

Cambridge (Regne Unit), 25 Juny 2018

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

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

**3rd International Conference “Fundamentals and applications of cerium dioxide in catalysis”**

Barcelona (Espanya), 25-27 Juny 2018

K. M. Neyman (*comité científic*)

*Density functional studies of ceria-based nanostructures for catalysis: Recent progress and challenges (comunicació oral)*

K. M. Neyman

**IUVSTA-ASEVA workshop “Physics and Chemistry of Nanoscale Oxide Systems”**

Àvila (Espanya), 1-6 Juliol 2018

*Density functional studies of ceria-based nanostructures: Recent progress and challenges (conferència convidada)*

K. M. Neyman

*Tracking The Properties Of Oxides From Nanoscale To Bulk: Implications For Nano-Oxide Based Technologies (conferència convidada)*

S. T. Bromley

**Invited seminar at The Hebrew University of Jerusalem**

Jerusalem (Israel), 2 Juliol 2018

*Bio-inspired Single-molecule Junctions*

I. Diez-Perez

**Invited seminar at The Weissman Institute of Science**

Rehovot (Israel), 5 Juliol 2018

*Bio-inspired Single-molecule Junctions*

I. Diez-Perez

**European Colloquium on Inorganic Reaction Mechanisms (ECIRM)**

Barcelona (Espanya), 8-11 Juliol 2018

*Zn(II) byproduct promotion of the Cu-catalyzed cross-coupling of bromozinc-difluorophosphonate with iodobenzoates (comunicació oral)*

J. Jover

*Phosphatase Activity of Binuclear Copper(II) Complexes: The Role of the Counteranions (pòster)*

G. Aullón

**Advanced Materials Workshop**

Duni (Bulgària), 11-14 Juliol 2018

*Atomic arrangement of PtCu bimetallic nanoparticles determined using topological energy expressions (comunicació oral)*

L. Vega, K. M. Neyman, F. Viñes

*Tuning Activity of Transition Metal Carbides by Surface Metal Alloying: Case of Study CO<sub>2</sub> Capture (comunicació oral)*

M. López, L. Broderick, J. J. Carey, F. Viñes, M. Nolan, F. Illas

**XXXIV Annual Meeting of the Reference Network in Theoretical and Computational Chemistry (XRQTC)**

Barcelona (Espanya), 12 Juliol 2018

G. Aullón, J.M. Bofill, J. Poater, C. Sousa (*organitzadors i chairpersons*)

*H<sub>2</sub> dissociation on transition metal carbide surfaces (pòster)*

J. J. Piñero, P. J. Ramírez, S. T. Bromley, F. Illas, F. Viñes, J. A. Rodriguez

*Quantum-classical approach to the reaction dynamics in superfluid helium nanodroplets. The Ne + Ne@(<sup>4</sup>He)<sub>N</sub> → Ne<sub>2</sub>@(<sup>4</sup>He)<sub>N'</sub> + (N-N')<sup>4</sup>He reaction (comunicació oral)*

M. Blancafort, A. Vilà, M. González

*A computational study of tacticity effect using RIS model (comunicació oral)*

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

**Frontiers and challenges of computing metals for biochemical, medical and technological Applications. CECAM workshop**

Paris (França), 11 Juliol 2018

*The reaction mechanism of catalase-peroxidases (conferència convidada)*

C. Rovira

**Hands of Science (HSCI2018)**

Barcelona (Espanya), 12 Juliol 2018

*Plastics and biodegradation: what is a bioplastic? (comunicació oral)*

O. Güell, F. Mas

**29<sup>th</sup> International Carbohydrate Symposium**

Lisboa (Portugal), 15 Juliol 2018

*Unusual catalytic itineraries of glycosidases unveiled from QM/MM metadynamics simulations (comunicació oral)*

C. Rovira

**28<sup>th</sup> International Conference in Organometallic Chemistry (ICOMC)**

Florència (Itàlia), 15-20 Juliol 2018

*Electronic and steric control of the Spin-Crossover behavior in  $[(Cp^R)_2Mn]$  manganocenes (conferència convidada)*

J. Cirera

**11<sup>th</sup> Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA)**

Toledo (Espanya), 17-19 Juliol 2018

*Magnetoresistance in Single-Molecule Devices (conferència convidada)*

E. Ruiz

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

M. Deumal

*Location of optimal bond breaking points on potential energy surfaces (pòster)*

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

*Gentlest Ascent Dynamics combined with Shrinking Dimer Method and Newtonian Dynamics and efficient way to explore Potential Energy Surfaces (pòster)*

J. M. Bofill, J. Ribas-Ariño, R. Valero, G. Albareda, I. de P.R. Moreira, W. Quapp

*DFT-based adsorption isotherms for pure and flue gases including SO<sub>2</sub> poisoning on Mg-MOF-74 (comunicació oral)*

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

*CO<sub>2</sub> capture via swing adsorption processes using faujasites (pòster)*

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

*Understanding the gas solubility behaviour in ionic liquids combining different molecular modelling tools: soft-SAFT and COSMO-RS (pòster)*

G. Alonso, P. Gamallo, R. Sayós, F. Llovell

**25<sup>th</sup> years of macromolecular crystallography in Barcelona**

Barcelona (Espanya), 18 Juny 2018

*The Fita-Rossmann catalytic mechanism (conferència convidada)*

C. Rovira

**ISQBP President's meeting 2018**

Barcelona (Espanya), 19 Juny 2018

*Catalysis by natural and engineered glycosidases (conferència convidada)*

C. Rovira

**18<sup>th</sup> IEEE International Conference on Nanotechnology - IEEE Nano 2018**

Cork (Irlanda), 23-26 Juliol 2018

*CO<sub>2</sub> Capture & Conversion Using Transition Metal Carbide Systems (comunicació oral)*

F. Viñes, C. Kunkel, Á. Morales-Garcia, F. Illas

*Tracking the Properties of Oxide Materials from Nanoscale to Bulk (conferència convidada)*

S. T. Bromley

**II Jornadas españolas de biocatálisis 2018**

Oviedo (Espanya), 25 Juliol 2018

*How carbohydrate-active enzymes work. Insight from computer simulation (conferència convidada)*

C. Rovira

**CECAM, Biomolecular Electronics**

Madrid (Espanya), 27 Juliol-31 Agost 2018

*Engineering Single-Protein Junctions (conferència convidada)*

I. Diez-Perez

**MESM2018 International Conference on Molecular Electronic Structure**

Metz (França), 28 Juliol-31 Agost 2018

J. M. Bofill (organització i chairperson)

*Biradical Species induced by Valence Tautomerism: a challenge for Electronic Structure Methods (comunicació oral)*

I. de P. R. Moreira, J. M. Bofill, R. Valero, G. Albareda

**43<sup>rd</sup> International Conference on Coordination Chemistry (ICCC2018)**

Sendai (Japó), 30 Juliol – 4 Agost 2018

*Magnetoresistance at Room Temperature in Single-Molecule Metalloporphyrin-Based Devices (conferència convidada)*

E. Ruiz

*The mechanism of the magnetic bistability in  $CuI(hfac)_2L_2Bu$  (conferència convidada)*

J. J. Novoa

**Italian Physical Chemistry Society**

Bolònia (Itàlia), 4 Agost 2018

*Studying Charge transport in Biological Molecular Moieties (comunicació keynote)*

I. Diez-Perez

**Symposium “Nano-alloys: Theory, Synthesis & Characterization”, XXVII International Materials Research Congress**

Cancun (Mèxic), 20-21 Agost 2018

K. M. Neyman (organitzador)

**21st Conference on Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction**

Praga (República Txeca), 26-27 Agost 2018

Sessió “Process Modelling”

J. Bonet (comitè científic, chairman)

*Surrogate model for carbon dioxide equilibrium absorption using aqueous monoethanolamine (comunicació oral)*

V. Plesu, J. Bonet, A.-E. Bonet-Ruiz, A. Chavarria, P. Iancu, J. Llorens

*Immission assessment inside an industrial ventilated room using CFD (pòster)*

V. Plesu, A.-E. Bonet-Ruiz, J. Bonet, P. Iancu, J. Llorens, L.-I. Becerra

*A heuristic for extractive agent flow rate in extractive distillation (pòster)*

V. Plesu, S. Cantero, A.-E. Bonet-Ruiz, J. Bonet, P. Iancu, J. Llorens

**7<sup>th</sup> EuCheMS Chemistry Congress - Molecular frontiers & global challenges**

Liverpool (Regne Unit), 26-30 Agost 2018

*Charge transport in bisdithiazolyl-based compounds (comunicació oral)*

C. Roncero

*Computational study of aluminum content tuning on FAU-type zeolites for optimal post-combustion CO<sub>2</sub> capture by swing adsorption processes (pòster)*

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

**European Conference on Surface Science, ECOSS 34**

Aarhus (Dinamarca), 26-31 Agost 2018

*Structure and Reactivity of Interstellar Nanodust (conferència convidada)*

S. T. Bromley

**International Symposium on Polyelectrolytes (ISP2018)**

Wegeningen (Països Baixos), 27 Agost 2018

*Charge regulation influence on conformational, binding and stretching properties of polyelectrolytes (pòster)*

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

**XXXth General Assembly of the International Astronomical Union – Session FM10: Nano Dust in Space and Astrophysics**

Viena (Àustria), 28-29 Agost 2018

*Formation, Processing and Properties of Nano-silicate Dust: a Bottom-up Computational Modelling Approach (conferència convidada)*

S. T. Bromley

**16th International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM)**

Rio de Janeiro (Brasil), 1-5 Setembre 2018

*Improving Slow Spin Relaxation Properties by Encapsulation (conferència convidada)*

E. Ruiz

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

Bolònia (Itàlia), 2-7 Setembre 2018

I. Díez-Pérez (*organitzador*)

*Importance of Solvation in Computational Electrocatalysis Models (comunicació oral)*

F. Calle-Vallejo

*Single-Protein Junctions (conferència convidada)*

I. Díez-Pérez

**Second European Symposium on Chemical Bonding**

Oviedo (Espanya), 3 Setembre 2018

*Aromaticity of closo boron hydride clusters linked to polycyclic aromatic hydrocarbons via Hückel's rule (conferència convidada)*

J. Poater



**XXth International Conference on Oxygen Binding and Sensing Proteins (O2BIP2018)**

Barcelona (Espanya), 3-6 Setembre 2018

Elnaz Aledavood, Axel Bidon-Chanal, Leonardo Boechi, Mauro Bringas, Lula Capece, Carolina Estarellas, Darío A. Estrín, F. Javier Luque, Constantí Seira, Silvia Chellini  
(organització del congrés)

**XXXVI GEQO Congress Organometallic Chemistry Group**

Saragossa (Espanya), 5-7 Setembre 2018

*The  $n-\pi^*$  interaction in transition metal complexes (comunicació oral)*  
J. Echeverría

**International Conference on Stereodynamics (Stereodynamics 2018)**

Arosa (Suïssa), 5-7 Setembre 2018

*Non-adiabatic charge transfer reactions in  $N_2O(^1\Sigma^+) + Na(^1S_0)$  collisions in the 0,50-5,00 keV laboratory energy range: An experimental study and a theoretical structure and dynamics approach (conferència convidada)*  
J. de Andrés, J. M. Lucas, J. M. Bofill, M. Albertí, A. Aguilar

**Graphene Week 2018**

Donosti (Espanya), 10-14 Setembre 2018

*Post-graphene organic Dirac materials with tunable spin-polarised and semiconducting states (comunicació oral)*  
S. T. Bromley

**"Advanced Materials" Workshop**

Duni (Bulgària), 11-14 Setembre 2018

*Understanding the origin of magnetic anisotropy in  $S=1/2$  mononuclear transition metal complexes (comunicació oral)*  
M. Amoza

*Density-functional modelling of nanocomposite materials for catalysis and new energy technologies (conferència plenària)*  
K. M. Neyman

*Oxazoline or oxazolinium ion? The protonation state and conformation of the reaction intermediate of chitinase enzymes revisited (conferència convidada)*  
J. Coines

**VII SEEDMOL, Simpósio de Estrutura Eletrônica e Dinâmica Molecular**

Brasília (Brasil), 17-21 Setembro 2018

*Bringing Quantum Chemical Models to the Limit: Ground State and Excited State Properties of Realistic Oxide Nanoparticles (conferència convidada)*

F. Illas

**3rd Workshop on Magnetically Induced Currents in Molecules**

Kragujevac (Sèrbia), 23 Setembro 2018

*Closo boron hydride clusters versus polycyclic aromatic hydrocarbons (conferència convidada)*

J. Poater

**BIO-COMP-CHEM Training School**

Bansko (Bulgària), 24-28 Setembro 2018

*Metalloenzymes as teaching tools for coordination chemistry: From bonding to spectroscopy (conferència convidada)*

J. Cirera

*A theoretical approach to the study of weak interactions in chemistry and biology (conferència convidada)*

J. Echeverría

**16<sup>th</sup> V.A. Fock Meeting on Quantum and Computational Chemistry**

Sochi (Rússia), 1 Octubre 2018

*Stopping power beyond the adiabatic approximation: application to polymeric materials (comunicació convidada)*

P. Alemany

**Ciencia en Acción (conferència de clausura)**

Viladecans (Espanya), 7 Octubre 2018

*La tabla periódica, un icono cultural (conferència convidada)*

S. Alvarez

**ACS on Campus**

Barcelona (Espanya), 18 Octubre 2018

*Scientific Publishing in Chemistry Now and Then (conferència convidada)*

F. Illas, F. Viñes, L. Vega

**2<sup>nd</sup> Carbohydrate and fluorine symposium**

Poitiers (França), 18 Octubre 2018

*An atomistic view to glycan hydrolysis by quantum mechanics/molecular dynamics (conferència convidada)*

C. Rovira

*Does the superacid media mimic the enzyme environment in a glycosidic reaction? computational study of the 2-deoxy- $\beta$ -glucose glycosyl cation in liquid HF/SbF<sub>5</sub> (comunicació oral)*

A. Nin-Hill

**2nd European Conference Molecular Spintronics (ECMol), Reunió COST Molspin**

Penyíscola (Espanya), 21-24 Octubre 2018

*Magnetic effects in single-molecule junctions (conferència convidada)*

I. Diez-Perez

*Room Temperature Magnetoresistance in Single-Molecule Devices (conferència convidada)*

E. Ruiz

**XI Iberoamerican Conf. on Phase Equilibria & Fluid Props. for Process Design (EQUIFASE)**

Cordoba (Argentina), 22- 25 Octubre 2018

*Molecular simulation study of the oil / water interface in the presence of different salts and surfactants (pòster amb menció honorífica)*

G. Alonso, P. Gamallo, A. Mejía, R. Sayós

**HPC-Europa3 Transnational Access Meeting**

Edimburg (Regne Unit), 23 Octubre 2018

*Noncovalent interactions involving nitrosyl ligands (conferència convidada)*

J. Echeverría

**Symposium in Honour of Professor Ernesto Carmona**

Sevilla (Espanya), 24-25 Octubre 2018

*Coordination Spheres within Proteins: a Shape Analysis (conferència convidada)*

S. Alvarez

**20th Conference of Nanoscience and Nanotechnology**

Sofia (Bulgària), 8 Novembre 2018

*How to distinguish the allergens of nonallergens proteins? (comunicació oral)*

M. Nedyalkova, S. Madurga, F. Mas, V. Simeonov

**“Química, una Ciencia Central”, Ciclo de Divulgación Científica del ISQCH (UZ-CSIC)**  
Saragossa (Espanya), 14 Novembre 2018

*Literatura de la química y química de la literatura (conferència convidada)*  
S. Alvarez

**I Tesimarató de Química**

Barcelona (Espanya), 21 Novembre 2018

*Carburs de metalls de transició nanoestructurats com a possible catalitzadors per a l'activació del metà (comunicació oral)*  
M. Figueras, F. Illas, F. Viñes

*Precisió dels Funcionals de la densitat en propietats superficials dels metalls de transició (comunicació oral)*  
L. Vega, K. M. Neyman, F. Viñes

*Control de l'activitat de carburs de metalls de transició mitjançant l'aliatge metàl·lic: Captura de CO<sub>2</sub> (comunicació oral)*  
M. López, F. Illas, F. Viñes

*Interacció del Carboni amb els Metalls de Transició (comunicació oral)*  
O. Piqué, F. Viñes

**Aromaticity 2018**

Riviera Maia (Mèxic), 28 Novembre 2018

*Role of aromaticity and H···H interactions in the stability of polycyclic aromatic hydrocarbons (conferència convidada)*  
J. Poater

**Trends in enzyme catalysis. Merging theory and experiment**

Benicàssim (Espanya), 29 Novembre 2018

*An atomistic view to glycan hydrolysis by quantum mechanics/molecular dynamics (conferència convidada)*  
C. Rovira

**Molim COST action working group 3 workshop. Ab-Initio Modelling of Molecular Processes Under Confinement**

Madrid (Espanya), 3-5 Decembre 2018

*Reactive and energy transfer processes involving atoms/molecules and superfluid helium nanodroplets (comunicació oral)*  
M. Blancafort, A. Vilà, M. González

**CECAM Workshop “Modeling metal-based nanoparticles: environment and dynamical effects”**

Grenoble (França), 3-5 Decembre 2018

K. M. Neyman (*chairperson*)

*Interface effects with oxide supports on the structure and reactivity of metal particles relevant for catalysis and energy technologies (conferència convidada)*

K. M. Neyman

**Scanning Tiny Biology**

Barcelona (Espanya), 12 Decembre 2018

*Electrostatic Catalysis in molecular nanoscale gaps (comunicació keynote)*

I. Diez-Perez

## ESTADES EN CENTRES EXTERNS

---

- Albareda, G. **Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter, Hamburg (Alemanya)**  
Estada de recerca amb Prof. Angel Rubio.  
Gener-Desembre 2018
- Albertí, M. **Univeristà di Perugia, Perugia (Itàlia)**  
Estada de recerca. Dipartimento di Chimica, Biologia e Biotecnologie.  
Febrer-Juliol 2018
- Alemanya, P. **Cavendish Laboratory, University of Cambridge, Cambridge (UK)**  
Investigador visitant UB convidat per E. Artacho.  
Febrer-Octubre 2018
- Bernuz, E. **Donostia International Physics Center, Donostia (Espanya)**  
Estada predoctoral de recerca amb Abel Carreras.  
Setembre 2018
- Coines, J. **Universitat de Cagliari, Cagliari (Itàlia)**  
Estada predoctoral de recerca amb Matteo Ceccarelli.  
Maig-Juliol 2018
- Curutchet, C. **Università di Pisa, Pisa (Itàlia)**  
Investigador visitant UB convidat per Benedetta Mennucci.  
Gener 2018
- Curutchet, C. **Gaussian Inc., Wallingford (CT, Estats Units)**  
Investigador visitant UB convidat per Giovanni Scalmani.  
Setembre-Octubre 2018
- Diez-Perez, I. **Department of Chemistry, Kings College London, London (Regne Unit)**  
Estada predoctoral de recerca amb Prof. Paula Booth.  
Gener-Desembre 2018
- Echeverría, J. **Vrije Universiteit, Amsterdam (Països Baixos)**  
Estada postdoctoral HPC-Europa3 amb Prof. Célia Fonseca.  
Abril-Maig 2018
- Martín-Rodríguez, A. **Department of Chemistry, Kings College London, London (Regne Unit)**  
Estada predoctoral de recerca amb Prof. Ismael Diez-Perez.  
Octubre 2018-Gener 2019

- Neyman, K. M.      **Boreskov Institute of Catalysis Russian Academy of Sciences, Novosibirsk (Rússia)**  
Investigador visitant convidat.  
Gener-Juny 2018
- Novoa, J. J.        **Utah University, Salt Lake City (EUA)**  
Estada de recerca amb Prof. Joel S. Miller.  
Febrer 2018
- Roncero, C.        **Universität Wien, Viena (Àustria)**  
Estada predoctoral de recerca amb Prof. Leticia González.  
Juny-Juliol 2018
- Viñes, F.          **Universidad de Antioquia, Medellín (Colòmbia)**  
Investigador visitant UB convidat per A. Moreno i E. Florez.  
Octubre 2018

## PARTICIPACIÓ EN PROJECTES D'INVESTIGACIÓ \_\_\_\_\_

*Force Fields in Redox Enzymatic Catalysis.*

I. Diez-Perez, Universitat de Barcelona

**Fields4CAT - 772391**, 2018-2023

ERC Consolidator

*Quantum Spectroscopy: exploring new states of matter out of equilibrium (Qspec-NewMat).*

A. Rubio, Max Planck Institute for the Structure and Dynamics of Matter

**ERC-2015-AdG\_694097**, 2016-2021

ERC Advanced Grant

*María de Maeztu Units of Excellence 2017 for the Institut de Química Teòrica i Computacional.*

F. Illas, Universitat de Barcelona

**MDM 2017-0767**, 2018-2022

Ministerio de Ciencia y Universidades

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

F. Illas, Universitat de Barcelona

2014

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

*Grup d'Estructura Electrònica.*

S. Alvarez, Universitat de Barcelona

**2017 SGR 1289**, 2017-2019

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

*Modelització i Disseny de Sistemes Químics Radicalaris.*

J. M. Bofill, Universitat de Barcelona

**2017 SGR 348**, 2018-2020

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

*Computational Materials Science Laboratory.*

F. Illas, Universitat de Barcelona

**2017 SGR 13**, 2018-2021

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

*Biologia Computacional i Disseny de Fàrmacs.*

F. J. Luque, Universitat de Barcelona

**2017 SGR 1746**, 2017-2020

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



*Grup de recerca consolidat: Estructura i funció en macromolècules.*

C. Rovira, Universitat de Barcelona

**2017 SGR 1189**, 2017-2020

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

*ICREA Acadèmia.*

F. Illas, Universitat de Barcelona

2016-2020

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

*ICREA Acadèmia.*

E. Ruiz, Universitat de Barcelona

2014-2018

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

*Beca Postdoctoral Juan de la Cierva.*

J. Echeverría, Universitat de Barcelona

2016-2018

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Quantum Technology Emerging Community in Catalonia: QuantumCAT.*

X. Oriols, Universitat Autònoma de Barcelona

**C-IU16-001544-0002**, 2018-2020

Quantum Flagship

*Atomic ordering in bimetallic nanoparticles of fcc-type: Pt-Cu.*

K. Neyman, Universitat de Barcelona

**QCM-2018-2-0012, QCM-2018-1-0029** 2018

Red Española de Supercomputación (RES)

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

K. Neyman, Universitat de Barcelona

**QCM-2018-3-0018**, 2018-2019

Red Española de Supercomputación (RES)

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

J. Poater, Universitat de Barcelona

**CTQ2016-77558-R**, 2016-2019

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

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

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

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

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Understanding, controlling and optimizing heterogeneous catalysts and photocatalysts at the nanoscale. Application to carbon dioxide conversion and hydrogen production.*

F. Illas, S. T. Bromley, Universitat de Barcelona

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

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Estructura electrónica y propiedades en moléculas y sólidos.*

E. Ruiz, Universitat de Barcelona

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

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Estructura electrónica y propiedades de moléculas y sólidos.*

P. Alemany, I. Díez-Pérez, Universitat de Barcelona

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

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Bioplastic Production From The Organic Fraction Of Municipal Solid Waste.*

J. Mata, J. Llorens, Universitat de Barcelona

**CTM2016-76275-R**, 2016-2019

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

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

C. Rovira, Universitat de Barcelona

**CTQ2017-85496-P**, 2018-2020

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Structure-based modeling of the role of the environment in photosynthetic light harvesting and protein fluorescence.*

C. Curutchet, Universitat de Barcelona

**CTQ2017-89924-P**, 2018-2020

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Diseño racional desde una perspectiva computacional de materiales basados en radicales orgánicos con propiedades de interés tecnológico.*

M. Deumal, J. J. Novoa, Universitat de Barcelona

**CTQ2017-87773-P**, 2018-2020

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Captura y separación de gases y contaminantes en procesos industriales sostenibles.*

R. Sayós, P. Gamallo, Universitat de Barcelona

**CTQ2014-53987-R**, 2015-2018

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Instituto Nacional de Bioinformática.*

M. Cascante, Universitat de Barcelona

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

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Training interdisciplinary glycoscientists to get a molecular-level grip on glycocodes at the human mucosa–microbiota interface.*

C. Rovira, Universitat de Barcelona

**814102-SWEET CROSSTALK**, 2019-2022

European H2020 Programme

*FRAGments training NETwork (FRAGNET).*

X. Barril, Universitat de Barcelona

**675899**, 2016-2020

European H2020 Programme

*Identificación, síntesis y evaluación toxicológica de molécula propia antidetonante.*

F. J. Luque, R. Lavilla, J. Gómez, Universitat de Barcelona

Referència **309799**, 2018-2019

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

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

R. Sayós, P. Gamallo, Universitat de Barcelona

2015-2018

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

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

F. Mas, 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.*

F. Mas, 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.*

F. Illas, Universitat de Barcelona

**PRACE - 2016163940**, 2017-2018

Partnership for Advanced Computing in Europe (PRACE)

*Explicit Control Over Spin-States in Technology and Biochemistry.*

M. Swart, Universitat de Girona, C. Sousa, Universitat de Barcelona

**CM1305**, 2014-2018

European Framework for Cooperation in Science and Technology (COST)

*Knowledge Led Structure Prediction for Nanostructures.*

S. Woodley, University College London

**EP/K038958/1**, 2013-2018

Engineering and Physical Sciences Research Council (UK)

*Materials Networking.*

K. Neyman, Universitat de Barcelona

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

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

*Theoretical Chemistry and Computational Modelling.*

M. 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).*

M. Cascante, Universitat de Barcelona

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

**654241**, 2015-2018.

Unió Europea

*Theoretical Chemistry and Computational Modelling (TCCM).*

J. J. Novoa Vide, Universitat de Barcelona

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

Unió Europea

*Deciphering the Metabolism of Haematological Cancers (HaemMetabolome).*

M. Cascante, Universitat de Barcelona

**8P1MCA - H2020. PILLAR 1-EXCELLENT SCIENCE. MCA. Marie Skłodowska-Curie Actions, 675790, 2015-2019**

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).*

K. Neyman, Universitat de Barcelona

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

Unió Europea

*QUIFIEXP - Química Física Experimental.*

J. Iñes, Universitat de Barcelona

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

PPID - Projectes d'Innovació Docent (UB)

*NOMAD – Novel Materials Discovery.*

M. Scheffler, Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Berlin

**NoMaD - 676580, 2015-2018**

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

*Synthesis and characterization of the structural modifications of  $Y_2WO_6:RE$  /TiO<sub>2</sub> core/shell nanoparticles ( $RE^{3+} = Eu, Sm$  and  $Gd, Er$  and the couple  $Er/Yb$ ) and their use as photoelectrodes for the improvement of the efficiency of red and NIR sunlight harvesting in DSSCs.*

J. Llanos, Universitat Catòlica del Norte, Antofagasta (Xile), P. Alemany, Universitat de Barcelona

**Fondecyt, 1181302, 2018-2021**

CONICYT

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

K. Neyman, Universitat de Barcelona

Universitat de Barcelona

**PRX17/00348, 2018**

Ministerio de Educación, Cultura y Deporte (MECD)

*Estudio del daño por radiación en materiales poliméricos mediante métodos de dinámica molecular cuántica no adiabática.*

P. Alemany, Universitat of Barcelona

Universitat de Barcelona

**PRX17/00268**, 2018

Ministerio de Educación, Cultura y Deporte (MECD)

*Mecanismos moleculares implicados en la inhibición de dianas para tratamientos anti-influenza: canal de protones M2 y hemaglutinina.*

F. J. Luque, Universitat de Barcelona

**SAF-2017-88107-R**, 2017-2020

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

*Discovery of New Antiparasitic Agents.*

F. J. Luque, Universitat de Barcelona, J. M. Bautista, Universidad Complutense de Madrid

2017-2018

Unión Iberoamericana de Universidades (UNIUN)

*Activadores de la proteína quinasa activada por AMP para el tratamiento de la enfermedad vascular asociada a la obesidad.*

F. J. Luque, Universitat de Barcelona, S. Fernández, A. Castro, Universidad Complutense de Madrid, CSIC

2018-2019

Fundació Eugenio Rodríguez Pascual

*Optimización de PharmScreen.*

F. J. Luque, E. Gibert, Universitat de Barcelona, Pharmacelera

2017-2018

Centro para el Desarrollo Tecnológico Industrial (CDTI)