

1.- Design of Organic Covalent Networks with Controllable Magnetic and Electrical Properties

Isaac Alcón^a and Stefan T. Bromley^{a,b}

^aComputational Material Science Laboratory (CMSL),
Departament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona

Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

^bInstitució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA), 08010 Barcelona (Spain)
e-mail: ialcon@ub.edu

2.- Ligand Tuning Spin–Crossover in the families [Fe(CN)X(SMe₂)(R₂PNMePR₂)] (R= Me, Ph)

Andrés Falceto Palacín, Jordi Cirera and Santiago Alvarez

Departament de Química Inorgànica & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona

Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

e-mail: andres.falceto@qi.ub.es

3.- Theoretical study of single-molecule magnets with S=1/2

Martín Amoza Dávila and Eliseo Ruiz

Departament de Química Inorgànica & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona

Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

e-mail: martin.amoza@qi.ub.es

4.- Atomically dispersed M species (M = Pd, Ni, Cu) in ceria nanoparticles: Stability and redox processes

Alberto Figueroba and Konstantin M. Neyman

Departament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona

Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

e-mail: afigure89@gmail.com

5.- Accurate determination of chemical ordering in several nm large bimetallic nanoparticles

Gábor Kovács, Sergey M. Kozlov, Ricardo Ferrando and Konstantin M. Neyman

Departament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona
Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain
e-mail: kovgabor1979@gmail.com

6.- Absorption spectrum of $[\text{Fe}(\text{bpy})_3]^{2+}$: Beyond the static approach

Alex Domingo, Carmen Sousa and Coen de Graaf

Departament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona
Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain
e-mail: c.sousa@ub.edu

7.- Unravelling the key driving forces of the spin transition in π -dimers of spiro-biphenalenyl-based radicals

Maria Fumanal, Fernando Mota, Juan J. Novoa and Jordi Ribas-Ariño

Departament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona
Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain
e-mail: mfumanal@gmail.com

8.- Fundamentals of Methanol Synthesis on Molybdenum Carbide Based Catalysts

Sergi Posada-Pérez, Francesc Viñes, Pedro J. Ramírez, José A. Rodríguez and Francesc Illas.

Departament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona
Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain
E-mail: sergiposada90@gmail.com

9.- Surface Contact Engineering in Photoactive ZnO Nanostructures

Oriol Lamiel-García,^a Francesc Viñes,^a Ana Iglesias-Juez,^b Marcos Fernández-García,^b and Francesc Illas^a

^a Departament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona

Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

^b Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, CSIC, c/Marie Curie 2, Cantoblanco, 28049, Madrid, Spain.
e-mail: francesc.vines@gmail.com

10.- The complete conformational free-energy landscape of β -xylose reveals a two-fold catalytic itinerary for β -xylanases

Javier Iglesias-Fernández, Lluís Raich, Albert Ardèvol and Carme Rovira

Departament de Química Orgànica & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona

Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

e-mail: lraich@ub.es

11.- Theoretical study of lanthanide-based mononuclear single molecule magnets

Roser Morales and Eliseo Ruiz

Departament de Química Inorgànica & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona

Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

e-mail: roser.morales.martinez@gmail.com

12.- Theoretical study of the Water-Gas shift reaction over Cu(111) using a kinetic Monte Carlo method

Hèctor Prats, Leny Álvarez, Francesc Illas and Ramón Sayós

Departament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona

Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

e-mail: hpratsga9@gmail.com

13.- Theoretical study of O₂, N₂ and CO₂ adsorption over Faujasites with different preadsorbed Na⁺ distributions

Gerard Alonso, Ramón Sayós, Xavier Giménez and Pablo Gamallo

Departament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona

Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

e-mail: g.alonso@ub.edu

14.- Crowding effect on oligomeric enzymes: Kinetic analysis of the ALKP-catalyzed hydrolysis

Claudia Hernández^a, Cristina Balcells^a, Mireia Via^a, Isabel Pastor^b, Josep Lluís Garcés^c, Sergio Madurga^a, Marta Cascante^d and Francesc Mas^a

^aDepartament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona

Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

^bSmall Biosystems Lab, Departament de Física Fonamental, Universitat de Barcelona, Barcelona, Spain

^cDepartament de Química, Universitat de Lleida, Lleida, Spain

^dDepartament de Bioquímica i Biologia Molecular & Institut de Biomedicina Universitat de Barcelona, Spain

email: chernandezcarro@gmail.com

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

Pablo Miguel Blanco^a, Mireia Via^a, Sergio Madurga^a, Josep Lluís Garcés^b, Eudald Vilaseca^a and Francesc Mas^a

^aDepartament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona

Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

^bDepartament de Química, Universitat de Lleida, Lleida, Spain

email: apple.pablo@hotmail.com

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

Sergio Madurga^a, Josep Lluís Garcés^b and Michal Borkovec^c

^aDepartament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona

Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

^bDepartament de Química, Universitat de Lleida, Lleida, Spain

^cDepartment of Inorganic, Analytical, and Applied Chemistry, University of Geneva, Geneva, Switzerland

email: s.madurga@ub.edu

17.- An Experimental and Theoretical point of view of Ion-Molecule Reactions

Estefania Lopez, Javier Aguilar, Josep Maria Lucas, Jaime de Andrés, Margarita Albertí and Antonio Aguilar

Departament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona

Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

email: a.aguilar@ub.edu

18.- The chemistry of Titan's atmosphere

Estefania Lopez^a, Josep Maria Bofill^b, Daniela Ascenzi^c, Josep Maria Lucas^a and Antonio Aguilar^a

^aDepartament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona

Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

^aDepartament de Química Orgànica & Institut de Química Teòrica i Computacional Universitat de Barcelona

Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

^cLaboratori de Física Atòmica i Molecular, Università degli Studi di Trento, Via Calepina, 14, 38122 Trento, Italia +39 0461 281111

email: a.aguilar@ub.edu