

## **1.- Using open-shell molecules to design 2D materials with controllable properties**

*Isaac Alcon*<sup>[1]</sup> and *Stefan T. Bromley*<sup>[1,2]</sup>

<sup>[1]</sup>Computational 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  
Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

<sup>[2]</sup>Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA), Passeig Lluís Company 23,  
CP: 08018, Barcelona (Spain)  
contact: ialcon@ub.edu

## **2.- On the Mechanism of Bistability in Molecule-Based Magnets: the PDTA case**

*Tommaso Francese*,<sup>[1]</sup>

<sup>[1]</sup>Departament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional  
Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain  
Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain  
Contact: xtinarb@gmail.com

## **3.- Study of spin interactions and magnetism in Cu(hfac)<sub>2</sub>L<sup>R</sup> (L<sup>R</sup>=butyl-pyrazolyl nitronyl nitroxide)**

*Cristina Roncero*,<sup>[1]</sup>

<sup>[1]</sup>Departament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional  
Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain  
Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain  
Contact: xtinarb@gmail.com

## **4.- On-lattice Monte Carlo simulations of enzyme kinetics in crowded intracellular environments**

*Enric Fortín*<sup>[1,2]</sup>, *Sergio Madurga*<sup>[1,2]</sup>, *Eudald Vilaseca*<sup>[1,2]</sup> and *Francesc Mas*<sup>[1,2]</sup>

<sup>[1]</sup>BioPhysChem group, Physical Chemistry Unit  
<sup>[2]</sup>Institut de Química Teòrica i Computacional  
Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain  
contact: s.madurga@ub.edu

## **5.- Study of the effect of macromolecular crowding with Brownian Dynamics simulations**

*Martí López*<sup>[1,2]</sup>, *Pablo M. Blanco*<sup>[1,2]</sup>, *Francesc Mas*<sup>[1,2]</sup> and *Sergio Madurga*<sup>[1,2]</sup>

<sup>[1]</sup>BioPhysChem group, Physical Chemistry Unit  
<sup>[2]</sup>Institut de Química Teòrica i Computacional  
Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain  
contact: s.madurga@ub.edu

## 6.- Towards a realistic modelling of protein diffusion in polymer crowded media

*Pablo M. Blanco*<sup>[1,2]</sup>, *Sergio Madurga*<sup>[1,2]</sup>, *Josep Lluís Garcés*<sup>[1,2]</sup> and *Francesc Mas*<sup>[1,2]</sup>

<sup>[1]</sup>BioPhysChem group, Physical Chemistry Unit

<sup>[2]</sup>Institut de Química Teòrica i Computacional

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

contact: s.madurga@ub.edu

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

*Daniel Bahamon*,<sup>[1]</sup> *Hèctor Prats*,<sup>[1]</sup> *Gerard Alonso*,<sup>[1]</sup> *Xavier Giménez*,<sup>[1]</sup> *Pablo Gamallo*<sup>[1]</sup>  
and *Ramón Sayós*<sup>[1]</sup>

<sup>[1]</sup>Departament de Ciència de Materials i Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional, Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

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

contact: r.sayos@ub.edu

## 8.- Design of an azo-based molecular switch controlled by light

*Alejandro Martín-Rodríguez*,<sup>[1]</sup> *Jorge Echeverría*<sup>[1]</sup> and *Eliseo Ruiz*<sup>[1]</sup>

<sup>[1]</sup>Departament de Química Inorgànica i Orgànica & Institut de Química Teòrica i Computacional  
Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

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

Contact: amrtn92@gmail.com

## 9.- Realistic modelling of the nucleation of nanosilicate dust particles using atomistic simulations

*Antoni Macià Escatllar*<sup>[1]</sup> and *Stefan T. Bromley*<sup>[1,2]</sup>

<sup>[1]</sup>Departament de Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional  
Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

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

<sup>[2]</sup>Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA), Passeig Lluís Companys 23,  
CP: 08018, Barcelona (Spain)

contact: tonimacia@gmail.com

## 10.- Angular momentum effects on the Ne+(<sup>4</sup>He)N --> Ne@(<sup>4</sup>He)N' + (N-N')<sup>4</sup>He capture process and quantised vortex formation: a quantum-classical approach.

*Miquel Blancafort Jorquera*,<sup>[1]</sup> *Arnau Vilà*<sup>[1]</sup> and *Miguel González*<sup>[1]</sup>

<sup>[1]</sup>Departament de Ciència de Materials i Química Física & Institut de Química Teòrica i Computacional, Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

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

Contact: m.blancafort.jorquera@gmail.com

## **11.- Unraveling brain diseases using QM/MM methods: Catalytic study of beta-galactocerebrosidase**

*Alba Nin-Hill,<sup>[1]</sup> Lluís Raich<sup>[1]</sup> and Carme Rovira<sup>[1,2]</sup>*

<sup>[1]</sup>Departament de Química Inorgànica i Orgànica & Institut de Química Teòrica i Computacional  
Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

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

<sup>[2]</sup>Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA), Passeig Lluís Company 23,  
CP: 08018, Barcelona (Spain)

Contact: albaninhill@gmail.com

## **12.- The reaction intermediate of GH18 chitinases: substrate conformation and protonation state**

*Joan Coines,<sup>[1]</sup> Mercedes Alfonso-Prieto,<sup>[1]</sup> Xevi Biarnés,<sup>[2]</sup> Antoni Planas<sup>[1]</sup> and Carme Rovira<sup>[1,3]</sup>*

<sup>[1]</sup>Departament de Química Inorgànica i Orgànica & Institut de Química Teòrica i Computacional  
Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

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

<sup>[2]</sup>Laboratory of Biochemistry, Institut Químic de Sarrià. Universitat Ramon  
Llull. Barcelona. Spain.

<sup>[3]</sup>Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA), Passeig Lluís Company 23,  
CP: 08018, Barcelona (Spain)

Contact: joancoines@gmail.com

## **13.- BCC Transition metal Surfaces: Trends in Work Functions and Surface Energies**

*Lorena Vega<sup>[1]</sup> i Francesc Viñes<sup>[1]</sup>*

<sup>[1]</sup>Departament de Ciència de Materials i Química Física & Institut de Química Teòrica i  
Computacional, Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

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

Contact: vegalorena24@gmail.com

## **14.- Estudi computacional de les interaccions enzim-substrat en l'enzim $\alpha$ -1,3-galactosil transferasa**

*David Almacellas,<sup>[1]</sup> Joan Coines<sup>[1]</sup> and Carme Rovira<sup>[1,2]</sup>*

<sup>[1]</sup>Departament de Química Inorgànica i Orgànica & Institut de Química Teòrica i Computacional  
Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

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

<sup>[2]</sup>Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA), Passeig Lluís Company 23,  
CP: 08018, Barcelona (Spain)

Contact: david.almacellas@gmail.com

## 15.- Modelització del complex de Michaelis d'un enzim glicosidasa

*Albert Pla,<sup>[1]</sup> Alba Nin-Hill,<sup>[1]</sup> Lluís Raich<sup>[1]</sup> and Carme Rovira<sup>[1,2]</sup>*

<sup>[1]</sup>Departament de Química Inorgànica i Orgànica & Institut de Química Teòrica i Computacional  
Universitat de Barcelona, Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain  
Martí i Franquès 1-11, 08028, Barcelona, Spain

<sup>[2]</sup>Institució Catalana de Recerca i Estudis Avançats (ICREA), Passeig Lluís Companys 23,  
CP: 08018, Barcelona (Spain)

Contact: david.almacellas@gmail.com