



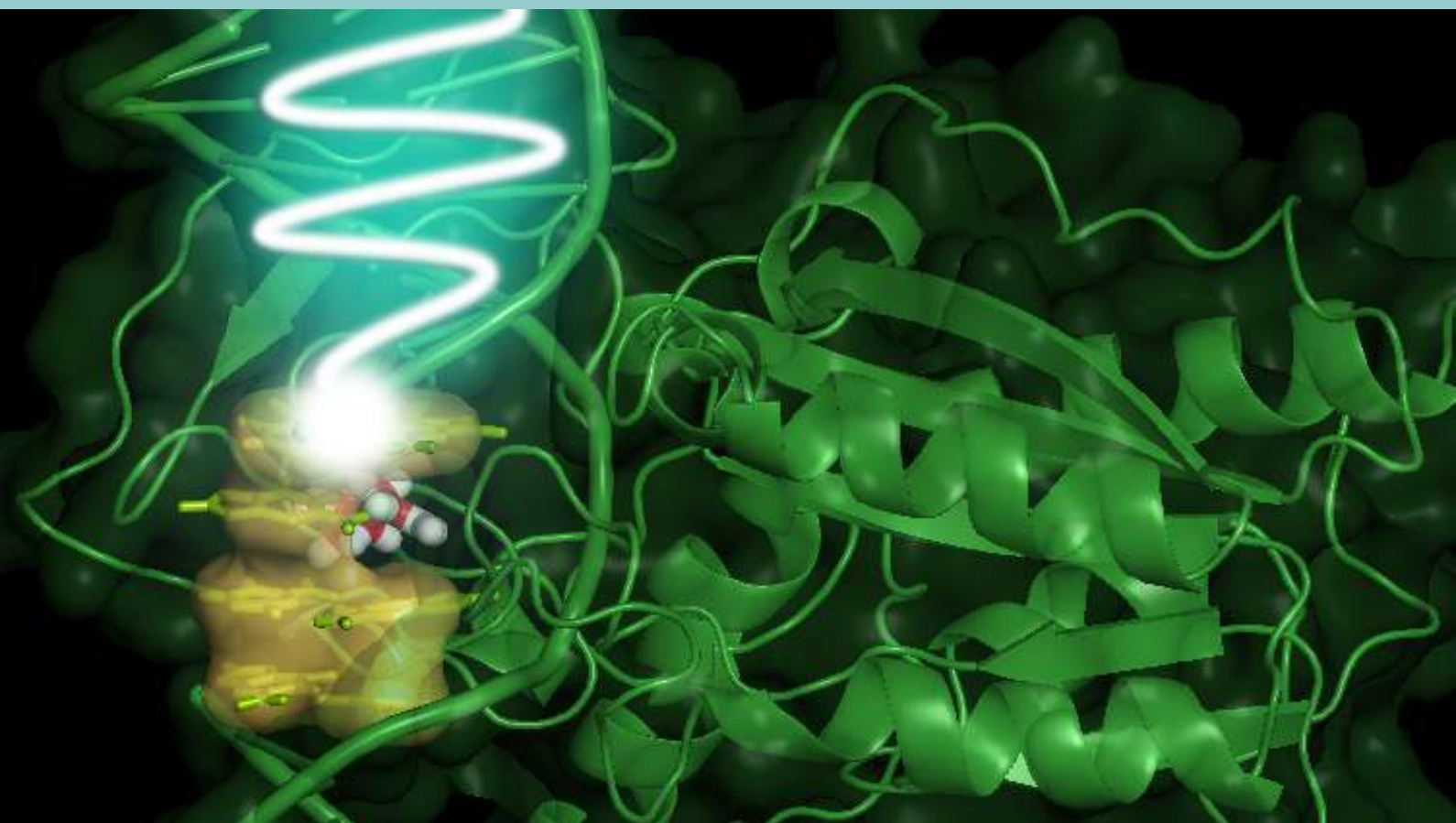
Institut de Química Teòrica
i Computacional



UNIVERSITAT DE
BARCELONA



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



Memòria d'activitats 2020



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 del 2018 tinc l'honor de ser-ne el Director. L'últim any ha estat complicat per a tota la humanitat. Malgrat aquest fet és de remarcar l'esforç fet pels investigadors del nostre Institut per mantenir la investigació a un nivell equivalent, fins i tot superior que els anys anteriors com queda reflectit en aquesta memòria. Un altre punt important ha estat la incorporació d'investigadors més sèniors a través de programes com el Beatriu de

Pinós, Juan de la Cierva, Ramón y Cajal i ICREA.

L'objectiu comú dels projectes de recerca duts a terme a l'Institut és l'ús de mètodes arrelats a la química quàntica encara que recentment, amb la incorporació de grups experimentals dels nostres departaments s'han pogut iniciar col·laboracions que van més enllà de la Química Computacional, fomentant i augmentant 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 els instruments emprats pels nostres investigadors no es troben en un laboratori típic sinó que es troben en un "laboratori" de càlcul que sovint és el punt d'entrada als nostres recursos computacionals o en 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 diferents aspectes com ara en el disseny racional de nous materials amb propietats físiques específiques i en la seva aplicació en dispositius electrònics i magnètics; en el descobriment de nous fàrmacs i a comprendre els processos bioquímics al darrere; en noves reaccions que proporcionen una millora dels processos químics per fer-los més eficaços i més respectuosos amb el medi ambient; i en 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	11
I.5 Equipaments	11
II. ACTIVITATS DE L'IQTCUB.....	26
II.1 Activitats de tipus general (cursos, beques i divulgació)	26
II.2 Seminaris i conferències de l'IQTCUB	34
II.3 Investigadors convidats per l'IQTCUB	35
III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB	37
III.1 Resultats més rellevants	37
III.2 Llista de publicacions	54
Articles publicats	54
Capítols de llibres i proceedings	70
III.3 Altres activitats	71
Tesis doctorals	71
Màsters	72
Participació a congressos	75
Estades en centres externs	80
Participació en projectes d'investigació	81
Sol.licitud de patent o marca	89

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 2020 la direcció de l'IQTCUB ha estat,

Prof. Eliseo Ruiz Sabin	<i>Director</i>
Prof. Carles Cifuentes Barat	<i>Secretari</i>
Prof. Francesc Illas Riera	<i>Vocal</i>

I.2 LÍNIES DE RECERCA DEL IQTCUB

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

1. Energia sostenible i neta

Quins són els mecanismes darrera dels processos químics vinculats a la conversió energètica? La modelització mitjançant la química computacional pot ajudar en el disseny de nous materials catalítics que afavoreixin la producció d'electricitat en sistemes de cel·la de combustible, així com també en la millora dels catalitzadors involucrats en l'activació del CO₂ i la conversió química o electroquímica d'aquest en molècules profitoses com ara el metà, l'etilè o l'etanol. A més a més, les aproximacions teòriques poden proveir una percepció valuosa en els mecanismes darrera de les interaccions petroli-aigua-roca tan importants en la millora de l'extracció de petroli.

2. Nanomaterials i nanoelectrònica

Quin component químic presenta les millor propietats magnètiques o electròniques? L'anàlisi mitjançant mètodes d'estructura electrònica un coneixement acurat de les bases físiques d'aquestes propietats. Els materials moleculars més prometedors poden incloure radicals orgànics, compostos de coordinació i materials 2D o 3D, que són interessants des del punt de vista tecnològic per la seva transferència d'energia, propietats magnètiques i elèctriques en l'intent de trobar materials multifuncionals. Per últim, els estudis computacionals són també extremadament útils per a proposar experiments que portin a la síntesi d'aquests tipus de materials.

3. Biomedicina i matèria tova

Quins són els mecanismes moleculars clau en els sistemes biològics? Les simulacions computacionals amb milers d'àtoms poden aplicar-se a la modelització de biomaterials i mecanismes moleculars en molècules biològicament rellevants. La implementació teòrica de la química quàntica en aquests sistemes és molt útil per a investigar 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.

I.3 MEMBRES DE L'IQTCUB

L'IQTCUB està constituït per un total de 115 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	Nacionalitat (Gènere)	Depart./Unitat (Secció)
Catedràtics			
Aguilar Navarro	Antonio	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Alemany i Cahner	Pere	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Alvarez Reverter	Santiago	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Aullón López	Gabriel	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Bofill Villà	Josep Maria	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Curutchet Barat	Carles E.	ESPANYA (M)	Farmàcia i Tec. Farma. i <u>Físicoquímica</u>
Deumal Solé	Mercè	ESPANYA (F)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
González Pérez	Miguel	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Illas Riera	Francesc	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Luque Garriga	Francisco J.	ESPANYA (M)	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i Gastronom.
Mas Pujadas	Francesc	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Novoa Vide	Juan José	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Rubio Martínez	Jaime	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Ruiz Sabin	Eliseo	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Sayós Ortega	Ramón	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Sousa Romero	Carme	ESPANYA (F)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Professors Titulars			
Costa Sala	Ramón	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
D. P. Ribeiro Moreira	Iberio	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Giménez Font	Xavier	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Huarte Larrañaga	Fermín	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Lucas Alcorta	Josep Maria	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Llunell Marí	Miquel	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Mota Valeri	Fernando	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Paniagua Valle	Juan Carlos	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Solé Sabaté	Albert	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Vilaseca Font	Eudald	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>

Professors Agregats

Bonet Ruiz	Jordi	ESPANYA (M)	<u>Enginyeria Química</u> i <u>Química Analítica</u>
Gamallo Belmonte	Pablo	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Madurga Díez	Sergio	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Reigada Sanz	Ramón	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Ribas Ariño	Jordi	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Viñes Solana	Francesc	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>

Professors d'Investigació ICREA

Bromley	Stefan T.	ANGLATERRA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Neyman	Konstantin	ALEMANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Poater Teixidor	Jordi	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Puigmartí-Luis	Josep	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Rovira Virgili	Carme	ESPANYA (F)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>

Professors Lectors

Bidon-Chanal Badia	Axel	ESPANYA (M)	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i Gastronom.
Jover Modrego	Jesús	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Plesu Popescu	Alexandra E.	ESPANYA (F)	<u>Enginyeria Química</u> i <u>Química Analítica</u>

Professors Associats

Cremades Martí	Eduard	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Jurado Mañas	Anabel	ESPANYA (F)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
López Marne	Estefanía	ESPANYA (F)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Vázquez Lozano	Javier	ESPANYA (M)	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i Gastronom.
Viayna Gaza	Antonio	ESPANYA (M)	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i Gastronom.

Investigadors Postdoctorals*Beatriu de Pinós-Juan de la Cierva*

Bruix Fusté	Albert	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Gómez Coca	Silvia	ESPANYA (F)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Liao	Quinhua	XINA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Llabrés Prats	Salomé	ESPANYA (F)	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i <u>Gastronom.</u>
Morales García	Ángel	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>

Ramón y Cajal

Calle Vallejo	Federico	COLÒMBIA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Cirera Fernández	Jordi	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Echeverría López	Jorge	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>

Contracte Projecte de Recerca

Alonso Benito	Gerard	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Belce	Yonca	TURQUIA (F)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Escartín Esteban	José María	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Ginex	Tiziana	ESPANYA (F)	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i <u>Gastronom.</u>
Mattera	Michele	ITÀLIA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Prats García	Hèctor	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Rodríguez San Miguel	David	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Sorrenti	Alessandro	ITÀLIA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Sun	Xiaobo	XINA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>

Altres

Albareda Piquer	Guillem	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Kolb	Manuel	ALEMANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Valero Montero	Rosendo	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Vilà Casanovas	Arnau	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>

Investigadors Predoctorals*Beca Programa Maria de Maeztu*

Colomer Llombart	Eduard	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Lleopart Motis	Genis	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Morales Salvador	Raúl	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Privat Contreras	Cristian	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Vidal Ramon	Daniel	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Vilchez Pérez	David	ESPANYA (M)	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i <u>Gastronom.</u>

Beca FI

Aledavood	Elnaz	ESPANYA (F)	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i <u>Gastronom.</u>
Blanco Andrés	Pablo Miguel	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Macià Escatllar	Antoni	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Mariñoso Guiu	Joan	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Martín Rodríguez	Alejandro	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Nin Hill	Alba	ESPANYA (F)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Piniello Castillo	Beatriz	ESPANYA (F)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Vega Domínguez	Lorena	ESPANYA (F)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>

Beca FPI

Almacellas Salillas	David	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Bernuz Fitó	Efrem	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Cánovas Montes	Manuel Ant.	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Cuxart Sánchez	Irene	ESPANYA (F)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Esquivias Baut. Lisb.	Oriol	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Gómez Mudarra	Francisco A.	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Piñero Vargas	Juan José	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Piqué Caufapé	Oriol	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Recio Poo	Miguel	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Regalado Aguilar	Mauricio	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Santiago Piera	Raúl	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>

Beca FPU

Lozano Reis	Pablo	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Vila Julià	Guillem	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Vilaplana Saiz	Marta	ESPANYA (F)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>

Beca ITN UE

Mnevets	Daniil	BIELORRÚSSIA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
---------	--------	------------------	---

Beca UB / ADR / APIF

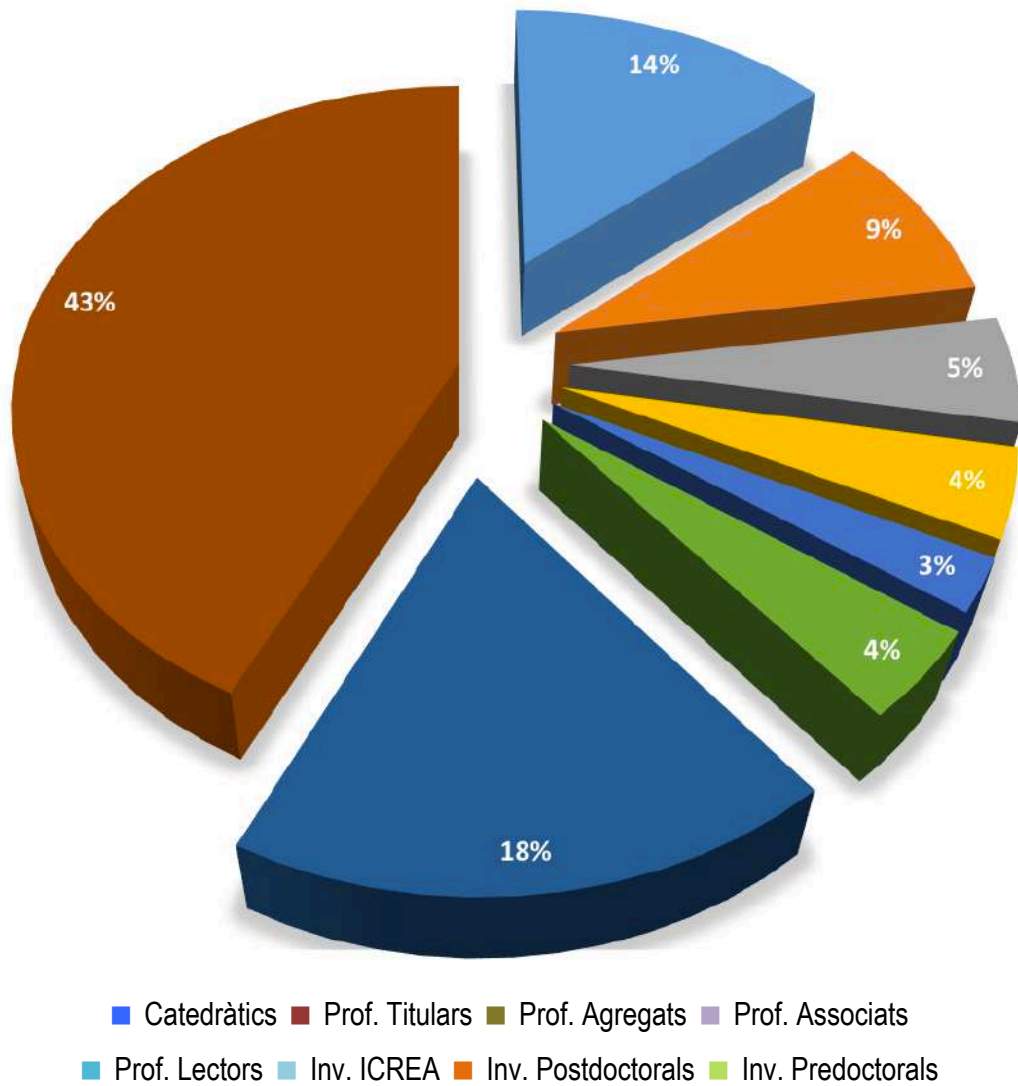
López Berbel	Martí	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Gonzalo Palao	Daniel	ESPANYA (M)	Farmàcia i Tec. Farma. i <u>Físicoquímica</u>
Navarro Maestro	Laia	ESPANYA (F)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Roncero Barrero	Cristina	ESPANYA (F)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Svobodova	Adela	ESPANYA (F)	<u>Ciència de Materials</u> i <u>Química Física</u>
Velásquez Benites	Juan Diego	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>

Beca Doctorat Industrial

Espel Grekopoulos	Joan	ESPANYA (M)	Farmàcia i Tec. Farma. i <u>Físicoquímica</u>
-------------------	------	-------------	---

Altres

Barazorda-Ccahuana	Haruna	PERÚ (F)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Campos-Vicens	Lluís	ESPANYA (M)	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i Gastronom.
Coines López-Nieto	Joan	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Figueras Valls	Marc	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
García Gonzalo	Lluc	ESPANYA (M)	<u>Química Inorgànica</u> i <u>Química Orgànica</u>
Kamalinahad	Saedeh	IRAN (F)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Morales Salvador	Raúl	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Nicholas	James	ANGLATERRA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Ozaydin	Gül Beste	TURQUIA (F)	Farmàcia i Tec. Farma. i <u>Físicoquímica</u>
Saranjam	Leila	IRAN (F)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Tarik	Karim	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>
Valdivia	Aitor	ESPANYA (M)	Nutrició, <u>Ciències Alimentació</u> i Gastronom.
Velasco	Arnau	ESPANYA (M)	Ciència de Materials i <u>Química Física</u>



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 i el suport als grups de recerca precisa d'un equip tècnic format actualment per:

Jordi Inglés Camats	<i>Administrador de sistemes (responsable)</i>
Irene Zamora Carretero	<i>Administrador de sistemes</i>
Silvia Chellini	<i>Suport a la recerca</i>
Begoña López Maestre	<i>Suport a la recerca</i>
Patricia Verdugo Salomón	<i>Disseny 3D</i>

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 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster SUN (4 armaris)
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES10
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul i servidor de discos (raid amb màster fent un total de 2.5TB). Servidor DHCP intern
<i>Estructura</i>	Màster + 111 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Conté tant processadors de 32 bits com de 64 bits.

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 S n 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 S n 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 S n 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 S n 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 €)

Tipus de màquina Clúster HP

Sistema Operatiu SLES10

Serveis Clúster de càlcul

Estructura 11 nodes en clúster

Comentaris 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 €)

Tipus de màquina Clúster HP

Sistema Operatiu SLES11

Serveis Clúster de càlcul

Estructura 101 nodes en clúster

Comentaris 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 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster heterogeni
<i>Sistema Operatiu</i>	SLES11.
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul
<i>Estructura</i>	32 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	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 S[®] permicro S[®] perServer 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 €)

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

*Especificacions:***2 nodes S[®] permicro 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 1 IPMI (OOB)

iqtc08 (valor invertit 175.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster HP
<i>Sistema Operatiu</i>	Centos 7.2
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul
<i>Estructura</i>	22 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Tots els processadors són de 64 bits

Especificacions:

22 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 1 IPMI (OOB)

iqtc09 (valor invertit 297.000 €)

<i>Tipus de màquina</i>	Clúster Gigabyte
<i>Sistema Operatiu</i>	Centos 7.2
<i>Serveis</i>	Clúster de càlcul
<i>Estructura</i>	26 nodes en clúster
<i>Comentaris</i>	Tots els processadors són de 64 bits

Especificacions:

26 Gigabyte R13

CPU: 2 x 2,9 GHz AMD EPYC 7542 32-core

RAM: 1 TB

HD: 1 x 2 TB SATA

Xarxa: 2 targetes 100/1000 (xarxa càlcul)

Xarxa: 2 targetes 10GB

Xarxa d'administració 1 IPMI (OOB)

Clúster GPU (valor invertit 75.000 €)

<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 GTX58

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

2 Nodes AZServer 4G3S

CPU: 2 x 2,2 GHz Dual Xeon E5-2600v4 (10 cores)
RAM: 128 GB
HD: 2 disc dur de 2 TB
Xarxa: 4 targetes 100/1000 (xarxa interna)
Xarxa d'administració IPMI
GPU: 4 NVIDIA GEFORCE GTX 1070Ti

SERVIDORS

Servidors de discos glusterfs (valor invertit 54.000 €)

<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

<i>Tipus de màquina</i>	<i>Supermicro</i>
<i>Sistema Operatiu</i>	Centos 7.6
<i>Serveis</i>	Clúster de discos formant 64TB de disc per exportar mitjançant NFS les aplicacions i el directori de treball en xarxa a tots els clústers
<i>Estructura</i>	1 node
<i>Comentaris</i>	Servei crític amb fonts redundants

*Especificacions:***Node S permicro 2U**

CPU: 2 x 2,20 GHz Xeon 4210

RAM: 64 GB

HD: 8 discs 8 TB (raid 5)

Xarxa: 4 targetes 100/1000

Xarxa: 2 targetes 10GB

Tipus de màquina DELL*Sistema Operatiu* Centos 7.6*Serveis* Clúster de discos formant 100TB de disc per exportar mitjançant Glusterfs les aplicacions i el directori de treball en xarxa a tots els clústers*Estructura* 1 node*Comentaris* Servei crític amb fonts redundants*Especificacions:***Node PowerEdge R740XD**

CPU: 2 x 2,20 GHz Xeon 4110

RAM: 64 GB

HD: 10 discs 10 TB (raid 5)

Xarxa: 4 targetes 100/1000

Xarxa: 2 targetes 10GB

Servidors d'entrada portals (valor invertit 4.500 €)*Tipus de màquina* Servidors d'accés a portal*Sistema Operatiu* Debian stable/ Debian 10.5*Serveis* SGE Execution Host, Heartbeat, ssh server*Estructura* 3 nodes*Comentaris* Portals d'entrada dels usuaris per enviar càlculs i accedir a les dades. Servei crític connectat amb un SAI.*Especificacions:***2 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 IPMI (OOB)

1 DELL Poweredge R640

CPU: 1 x 2,2 GHz Xeon Silver 4210
RAM: 16 GB
HD: 1 disc de 256 GB (Sistema operatiu)
Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna
Xarxa d'administració IPMI (OOB)

Servidors de virtualització (valor invertit 28.300 €)

Tipus de màquina 4 màquines redundants
Sistema Operatiu Debian stable
Serveis Xenha i tots els serveis virtuals ofertats a l'IQTCUB
Estructura 4 nodes redundants
Comentaris Màquina que encabeix les màquines virtuals del IQTCUB (SGE, dhcp, servidor llicències etc.). Suportada per un SAI conjuntament amb portals. Servei crític connectat a un SAI.

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: 3 targetes 100/1000 xarxa interna

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: 3 targetes 100/1000 xarxa interna

Tipus de màquina 1 màquina
Sistema Operatiu Centos 7.3
Serveis Entorn de proves
Estructura 1 nodes
Comentaris Màquina de reproducció dels serveis

Especificacions:

1 Node DELL PowerEdge R640

CPU: 2 x 2 GHz Xeon Gold 6138
RAM: 128 GB
HD: 2 discos de 2 TB (raid 1)
Xarxa: 2 targetes 100/1000 xarxa interna
Xarxa d'administració iDrac

Servidor de visualització (valor invertit 3.000 €)

Tipus de màquina 1 màquina HP ProLiant DL385

Sistema Operatiu SLES10

Serveis Màquina per utilització d'aplicacions gràfiques (gaussview, p4vasp, etc.)

Estructura 1 màquina

Comentaris 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'iqt cub).
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, iqt c01, iqt c02, iqt c03).
7. 4 Switchs Layer 2 HP de 48 ports (xarxa interna clúster iqt c04, iqt c05 i iqt c06).

8. 3 Switchs Infiniband Voltaire de 36 ports (xarxa càlcul iqt04).
9. Switch modulable HP (8 mòduls per xarxa interna clúster iqt01,iqt02,iqt03).
10. 2 Switchs modulables HP 10 GB (xarxa interna clúster iqt06 i servidors de fitxers).
11. 2 Switchs Netgear XS728T 10 GB (xarxa interna i dades clúster iqt08).
12. 1 Switch HPE 1810-24 (xarxa interna clúster iqt08).
13. 2 portàtils MSI amb ulleres VR Oculus Rift-S (investigació amb realitat virtual)
14. Impresora 3D XYZ da Vinci Color AIO.
15. 3 Oculus Quest.

El valor invertit de l'equipament/maquinari addicional del que disposa l'IQTCUB és d'aproximadament 56.000 €.

RESUM DEL POTENCIAL DE CÀLCUL

Cores.....5,726 c

Memòria..... 64,886 GB RAM

Discs de Càlcul.....318 TB

Discs d'Usuari.....80 TB

El valor invertit aproximat total, tenint en compte també el material consumible com cablejat de xarxa i d'altres és de **2.410.000 €***

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



Clústers del IQTCUB, iqt08 (esquerra) i clúster de GPUs (dreta).

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 2020.

- a. **Promoció i incentivació a la recerca.** Enguany l'IQTCUB ha concedit dos ajuts d'iniciació a la recerca per a estudiants de Màster i tres ajust per estudiants que ja han acabat el Màster (Post-Màster). Aquestes beques es destinen a estudiants que estan en l'etapa final del grau o del Màster per incentivar la col·laboració amb algun dels projectes de recerca dels grups de l'IQTCUB. Les ajudes per a estudiants de Màster han sigut per Eloi Sánchez Ambrós i Néstor Mauricio García-Romeral i les ajudes de Post-Master per Ling Meng, Gul Beste Ozaydin i Riccardo Farris. Més informació a <https://www.iqtc.ub.edu/education-outreach/fellowships/>

Despesa associada: 2.000 € (ajuda Màster) i 3.000 € (Post-Màster)



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

- b. **Dones en la Recerca Científica.** Aquesta jornada està destinada a la difusió de la recerca realitzada per dones científiques. La jornada va ser el 11 de Febrer de 2020. Entre les participants Dra. Roberta Sinatra de la Universitat de Copenhagen, Dra. Joaquina Álvarez del CSIC i la Dra. Núria Salan de la UPC.



DONES EN LA RECERCA CIENTÍFICA

15:00H **QUANTIFYING THE BIASES OF SCIENTIFIC SUCCESS**
DRA. ROBERTA SINATRA,
IT UNIVERSITY OF COPENHAGEN.

16:00H **DEBAT I CAFÈ**
AMB LA PARTICIPACIÓ DE
DRA. JOAQUINA ALVAREZ MARRON (CSIC-JAUME ALMERA),
DRA. NÚRIA SALAN BALLESTEROS (UPC)
I DRA. ROBERTA SINATRA.

LLOC: AULA ENRIC CASASSES I ATRI
SOLAR DE LES FACULTATS DE FÍSICA I QUÍMICA UB

11 FEBRER 2020
DIA INTERNACIONAL DE LES DONES I LES NENES A LA CIÈNCIA

in⁺ Institut de Neurociències i Neuroevolució | **iqtc** Institut de Química Teòrica i Computacional UNIVERSITAT DE BARCELONA | Facultat de Biologia | Facultat de Física | Facultat de Ciències de la Terra | **ICCUB** Institut de Ciències del Cosmos UNIVERSITAT DE BARCELONA | **Institut de Recerca de l'Aigua** | **ICMCS** Institute of Complex Systems UNIVERSITAT DE BARCELONA

Anunci de la jornada.

c. **Activitats de divulgació científica.** El Prof. Xavier Giménez Font ha realitzat la següent sèrie de xerrades de divulgació científica durant aquest any 2020:

1. “Més petit i millor impossible: les promeses dels motors moleculars”. Toc–Toc UB Science Dissemination Program, Institut de Vilafant, Vilafant, 8/gen/2020.
2. “UB s’Apropa 20”. Institut Manuel Blancafort, La Garriga, 9/gen/2020.
3. “UB s’Apropa 20”. Col·legi Pare Manyanet, Barcelona, 14/gen/2020.
4. “L’Aire que Respirarem”, Toc–Toc UB Science Dissemination Program, Agrupació Astronòmica de Sabadell, Sabadell. 15/gen/2020.
5. “UB s’Apropa 20”. Institut Creu de Saba, Olesa de Montserrat, 16/Jan/2020.
6. “UB s’Apropa 20”. Institut Joan Brossa, Barcelona, 16/gen/2020.
7. “UB s’Apropa 20”. Institut Montserrat Miró, Montcada i Reixac, Social & Human Science students, 17/gen/2020.
8. “UB s’Apropa 20”. Institut Montserrat Miró, Montcada i Reixac, Experimental Science & Technology students, 17/gen/2020.
9. “L’Aire que Respirarem”, Toc–Toc UB Science Dissemination Program, Institut Maria Espinalt, Barcelona. 17/gen/2020.
10. “UB s’Apropa 20”. Institut Angeleta Ferrer i Sensat, Sant Cugat del Vallès, Group A students, 20/gen/2020.
11. “UB s’Apropa 20”. Institut Angeleta Ferrer i Sensat, Sant Cugat del Vallès, Group B students, 20/gen/2020.
12. “UB s’Apropa 20”. Institut Vil·la Romana, La Garriga, 21/gen/2020.
13. “UB s’Apropa 20”. Institut Joan Oliver, Sabadell, 22/gen/2020.
14. “UB s’Apropa 20”. Institut de Mollet, Mollet del Vallès, 23/gen/2020.
15. “UB s’Apropa 20”. Institut El Cairat, Esparreguera, 23/gen/2020.
16. “UB s’Apropa 20”. Institut Montserrat Colomer, Sant Esteve Sesrovires, 24/gen/2020.
17. “UB s’Apropa 20”. Saint Nicholas School, Barcelona, 24/gen/2020.
18. “UB s’Apropa 20”. Institut Pau Vila, Sabadell, 29/gen/2020.
19. “UB s’Apropa 20”. Institut Lauro, Les Franqueses del Vallès, 30/gen/2020.
20. “UB s’Apropa 20”. Institut Vinyet, Sitges, 31/gen/2020.
21. “UB s’Apropa 20”. Institut Jaume Balmes, Barcelona, 31/gen/2020.
22. “UB s’Apropa 20”. Institut Lluís de Requesens, Molins de Rei, 3/feb/2020.

23. "UB s'Apropa 20". Institut Miramar, Viladecans, 4/feb/2020.
24. "UB s'Apropa 20". Escola Jesuïtes Sant Gervasi — Infant Jesús, Barcelona, 6/feb/2020.
25. "UB s'Apropa 20". Institut Joaquina Pla i Farrera, Sant Cugat del Vallès, 7/feb/2020.
26. "UB s'Apropa 20". Institut Polinyà, Polinyà, 7/feb/2020.
27. "UB s'Apropa 20". Institut La Roca, La Roca del Vallès, 13/feb/2020.
28. "UB s'Apropa 20". Escola Montagut, Vilafranca del Penedès, 13/feb/2020.
29. "L'origen dels elements químics". Toc–Toc UB Science Dissemination Program, Institut Salvador Dalí, El Prat de Llobregat, 14/feb/2020.
30. "UB s'Apropa 20". Institut Vescomtat Cabrera, Hostalric, 17/feb/2020.
31. "UB s'Apropa 20". Institut Sentmenat, Sentmenat, 19/feb/2020.
32. "UB s'Apropa 20". Institut Miramar, Viladecans, 20/feb/2020.
33. "UB s'Apropa 20". Institut Torre de Malla, Parets del Vallès, 26/feb/2020.
34. "UB s'Apropa 20". Institut Creu de Saba, Olesa de Montserrat, 27/feb/2020.
35. "UB s'Apropa 20". Institut Les Termes, Sabadell, 27/feb/2020.
36. "UB s'Apropa 20". Escola Pia, Caldes de Montbui, 2/mar/2020.
37. "UB s'Apropa 20". Escola Daina Isard, Olesa de Montserrat, 4/mar/2020.
38. "UB s'Apropa 20". Institut Voltreganès, Les Masies de Voltregà, 5/mar/2020.
39. "Apropa't a la UB 20". Talk for Escola Lleó XIII, Universitat de Barcelona, 6/mar/2020.
40. "Metales tóxicos, y sus efectos ambientales y sobre la salud humana", On–line Seminar, Biological Inorganic Chemistry course, Universidad de Sevilla, 29/abr/2020.
41. "Llibres de Divulgació Científica", Màster de Comunicació Especialitzada, Univ. Barcelona, 9/nov/2020.
42. "La Màgia de l'Aigua". Toc–Toc UB Science Dissemination Program, Institut Escola Eixample, Barcelona, 16/nov/2020.
43. "La Màgia de l'Aigua". Toc–Toc UB Science Dissemination Program, Institut Escola Eixample, Barcelona, 19/nov/2020.

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. “Óxido de etileno: qué es, para qué se usa, y que efectos tiene para tu salud si lo respiras”. Interview by José Pichel, El Confidencial Journal, 14 gener, 2020: https://www.elconfidencial.com/tecnologia/ciencia/2020-01-15/explosion-tarragona-causas-problemas-efectos_2412020/
2. “Què és l'òxid d'etilè? Per què és tan inflamable?”. Interview by Pere Renom and Helena Garcia Melero, program “Tot es mou”, TV3. 15 gener 2020: <https://www.ccma.cat/tv3/alcanta/tot-es-mou/que-es-loxid-detile-per-que-es-tan-inflamable/video/6008166/>
3. “Explosió a la petroquímica: hi va haver núvol tòxic o no?”. Interview by Toni Clapés, program “Versió RAC1”, RAC1 Radio. 15 gener 2020: <https://www.rac1.cat/programes/versio/20200115/472913159085/petroquimica-iqoxe-tarragona-nuvol-toxic-oxid-etile.html>
4. “Les petroquímiques són imprescindibles per entendre la vida d'avui”. Interview by Robert Calvo, for “La Brúixola” program, Onda Cero Radio. 15 gener, 2020: https://www.ondacero.es/emisoras/catalunya/audios-podcast/bruixola/les-petroquimiques-son-imprescindibles-per-entendre-la-vida-davui_202001155e1f9a8c0cf2d11c7c2d33e1.html
5. “Los riesgos para la salud del 5G, la polémica en el Mobile World Congress”. Interview by Ignasi Jorro, Cronica Global section of El Español Journal. 16 gener 2020: https://cronicaglobal.elespanol.com/business/ada-colau-mobile-world-congress_309704_102.html

6. “Tres falsos mitos sobre los coches de hidrógeno”. Interview by Marta Andreu, Motor Section of La Vanguardia Journal. 3 març 2020:
<https://www.lavanguardia.com/motor/actualidad/20200227/473658774341/3-falsos-mitos-sobre-los-coches-de-hidrogeno-movilidad-futuro-hyundai-electricos.html>
7. “El MMS, el dióxido de cloro o el clorito de sodio curan el nuevo coronavirus?”. Interview by Miguel Ángel Bravo for AFP Factual, 17 abril 2020: <https://factual.afp.com/el-mms-el-dioxido-de-cloro-o-el-clorito-de-sodio-pueden-ser-daninos-para-la-salud-y-no-hay-pruebas>
8. “Alertan que el MMS es muy peligroso y no cura la COVID-19”. Interview by Mariela León for Cambio16 journal, 21 abril 2020:
<https://www.cambio16.com/alertan-el-peligro-del-mms-para-combatir-coronavirus/>
9. 81. “El teletreball: un abans i un després per a la contaminació a Barcelona”. Interview by Adrià Lizanda for Tot Barcelona digital journal, 25 abril 2020: https://www.totbarcelona.cat/economia/teletreball-llico-confinament-esperanca-medi-ambient_2121375102.html
9. “La verdad del MMS y CDS. ¿Curan enfermedades? ¿Estafa o panacea? | MMS Parte II | Medicina Clara”. Interview by Dr. Fernando Fernández Bueno for Medicina Clara Youtube Channel, 27 maig 2020:
<https://www.youtube.com/watch?v=5GDv1K9JxK4>
10. “¿Puede explotar una botella de gel desinfectante por el calor en el coche?”. Interview by Marta Andreu for Motor Section, La Vanguardia journal, 2 juny 2020:
<https://www.lavanguardia.com/motor/actualidad/20200602/481393338430/pued-e-explotar-hidrogel-calor-coche-incendio-foto-desescalada-confinamiento-coronavirus-covid-19.html>

11. “¿Puede explotar la batería de un patinete eléctrico?”. Interview by Marta Andreu for Motor Section, La Vanguardia journal, 22 juny, 2020: <https://www.lavanguardia.com/motor/actualidad/20200722/482326177940/puede-explotar-bateria-patinete-electrico-incendio.html>
12. “No, el dióxido de cloro i el MMS no curen el Coronavirus”. Interview by Martí Odriozola for Verificat.cat digital journal, 4 agost 2020: <https://www.verificat.cat/fact-check/no-el-dioxid-de-clor-i-lmms-no-curen-el-coronavirus>
13. “L'MMS, medicament miraculós”. Interview by Alba Tobella for Fact-checking Section, Aquí amb Josep Cuní program, SER Catalunya Radio, 7 agost, 2020: <https://play.cadenaser.com/audio/1596789138261/>
14. “Un laser para medir la atmósfera”. Interview by Leyre Flemerique, Big Vang section of La Vanguardia Journal, 21 agost 2020: <https://www.lavanguardia.com/ciencia/20200811/482787188405/laser-rayo-atmosfera-concordia-antartida-lidar.html>
15. “Verdades y mentiras sobre el dióxido de cloro”. Interview By Claudia Chávez for Ojo-Público digital journal, Perú, 23 setembre 2020: <https://ojo-publico.com/2116/mitos-y-verdades-sobre-el-uso-del-dioxido-de-cloro>
16. “Cómo evitar contagios de la Covid-19 por aerosoles en el coche”. Interview by Marta Andreu for La Vanguardia journal, Moveo Section, 21 octubre 2020: <https://www.lavanguardia.com/motor/consejos/20201021/33867/como-evitar-contagios-covid-19-aerosoles-coche.html>
17. “El dióxido de cloro no debe ingerirse pero puede usarse como desinfectante contra la Covid-19”. Interview by Natalia Sanguino for AFP Factual España digital press agency, Madrid, 4 novembre 2020: <https://factual.afp.com/el-dioxido-de-cloro-no-debe-ingerirse-pero-puede-usarse-como-desinfectante-contra-el-covid-19>

18. “Els fogons, forns i estufes de gas suposen risc encara que no hi hagi mala combustió”. Interview by Victor Endrino for RAC1 digital edition, 10 desembre 2020: <https://www.rac1.cat/societat/20201210/491028602935/gas-natural-butano-llar-de-foc-combustio-riscos-perills-forn-fogons-estufa.html>

II.2 SEMINARIS I CONFERÈNCIES DE L'IQTCUB

Els Drs. Carles Curutchet i Jordi Poater han organitzat els seminaris i conferències de l'IQTCUB d'enguany:

1. **Dr. Paul Bagdasarian** (University of North Texas) Denton, EUA.
Golden years in the development of Quantum Chemistry at Chicago (LMSS) and San Jose (IBM): Lessons that are relevant today.
22 Gener 2020.
2. **Dr. Edward Matito** (Donostia International Physics Center, DIPC), Donosti, Espanya.
Singling out dynamic and nondynamic correlation
25 Febrer 2020.
3. **Dr. Pablo Ordejón** (ICN2), Barcelona, Espanya.
Computing the properties of materials and devices from first principles: 25 years of SIESTA
9 Octubre 2020.

II.3 INVESTIGADORS CONVIDATS PER L'IQTCUB

Durant el 2020, l'IQTCUB ha acollit un total de set visites temporals d'investigadors externs.

1. **MSc. Masoomeh Keyhanian** (investigador convidat).
University of Mazandaran, Iran.
Gener-Desembre 2020.
2. **MSc. Hedda Oschinski** (investigador programa ERASMUS)
Leibniz University, Alemanya.
Gener-març 2020.
3. **Nicola Danielis** (investigador convidat).
University of Trieste, Itàlia.
Gener-abril 2020.
4. **Enrico Bisquoli** (investigador convidat).
University of Pisa, Itàlia.
Gener-juny 2020.
5. **MSc. Lizzie Sargeant** (investigador HPC Europa).
Birmingham University, Regne Unit.
Juliol-setembre 2020.
6. **Alberto Pérez de Alba Ortiz** (investigador convidat).
University of Amsterdam, Països Baixos.
Agost-octubre 2020.

7. **Ferran Nieto Fabregat** (investigador convidat)

University of Naples, Itàlia.

Setembre-desembre 2020.

III. ACTIVITAT CIENTÍFICA DELS MEMBRES DE L'IQTCUB

III.1 RESULTATS MÉS RELLEVANTS

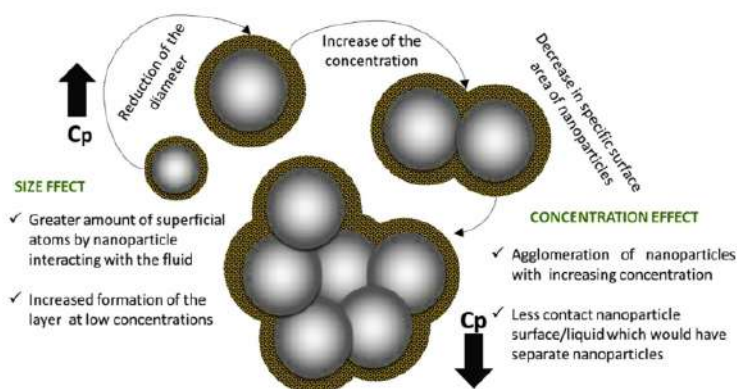
En aquesta secció es descriuen alguns dels resultats més rellevants obtinguts per cada línia de recerca de l'IQTCUB.

LÍNIA 1. ENERGIA NETA I SOSTENIBLE

Effect of nanoparticles in molten salts – MD simulations and experimental study.

A.Svobodova-Sedlackova, C. Barreneche, G. Alonso, A. I. Fernández, P. Gamallo.

Renew. Energy, 152 (2020) 208-216.



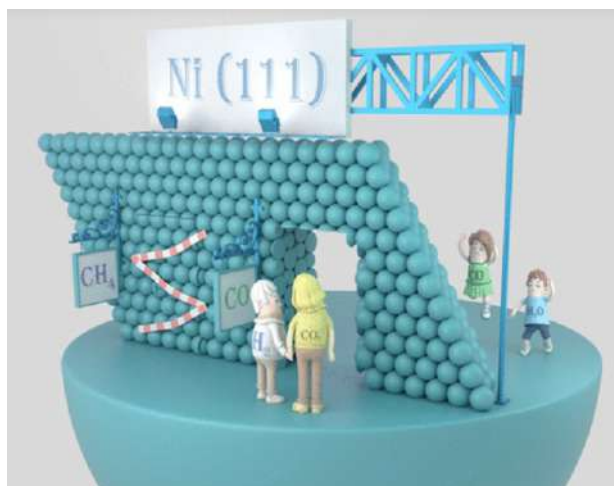
Principals paràmetres que afecten la capacitat calorífica: la concentració i la mida de les nanopartícules del nanofluid.

Estudis experimentals realitzats a nanofluids revelen un increment anòmal de la capacitat calorífica específica del fluid quan s'introdueixen nanopartícules. Aquest increment és realment important ja que aquests nanofluids es poden aplicar en plantes de generació elèctrica per concentració solar com a fluid de transferència i emmagatzematge de calor. Els resultats obtinguts són prometedors per al desenvolupament d'aplicacions d'emmagatzematge tèrmic i de materials amb millors característiques per emmagatzemat calor. S'ha estudiat l'efecte de les nanopartícules de SiO_2 en sal fosa (NaNO_3) mitjançant simulacions de dinàmica molecular i experiments de calorimetria d'escaneig diferencial (DSC). L'estudi mostra que per una concentració de nanopartícules al voltant de 1% en pes, la C_p del sistema s'incrementa en un 26% respecte el valor del NaNO_3 pur i que a concentracions més elevades l'efecte desapareix.

Multiscale study of the mechanism of catalytic CO₂ hydrogenation: role of the Ni(111) facets.

P. Lozano-Reis, H. Prats, P. Gamallo, F. Illas, R. Sayós.

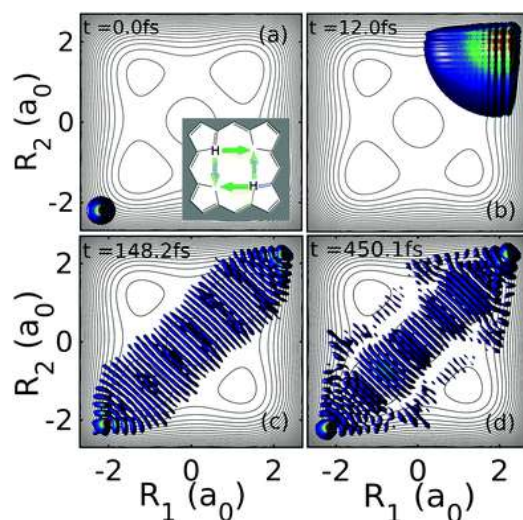
ACS Catal., 10 (2020) 8077-8089.



El mecanisme molecular de la hidrogenació de CO₂ en superfícies de Ni(111) ha estat investigat mitjançant càlculs periòdics de la teoria del funcional de la densitat, incloent la dispersió i simulacions tipus Monte Carlo cinètic on també s'han inclòs les interaccions laterals entre els adsorbats. El model de reacció proposat conté 25 espècies diferents i un total de 86 processos elementaris que inclouen adsorcions, desorcions, reaccions químiques superficials i difusions. La xarxa de reaccions té en compte tres mecanismes diferents per a la reacció inversa a la *water-gas shift* i tres mecanismes diferents per a la metanació. Les simulacions tipus Monte Carlo cinètic revelen que la reacció inversa a la *water-gas shift* domina la hidrogenació del CO₂ en superfícies Ni(111) amb cap evidència de formació de metà. La reacció procedeix principalment a través de la ruta redox, encara que la via carboxil és també activa però en menor extensió.

Quantum equilibration of the double-proton transfer in a model system porphine.

G. Albareda, A. Riera, M. González, J. M. Bofill, I. P. R. Moreira, R. Valero, I. Tavernelli.

Phys. Chem. Chem. Phys., 22 (2020) 22332.

Densitat de probabilitat dels dos protons a quatre temps representatius. La densitat nuclear inicialment ben localitzada després dóna pas a una forta deslocalització dels protons al llarg de la via síncrona que es manté durant almenys 1 ps.

Hi ha un renovat interès en la derivació de la mecànica estadística a partir de la dinàmica de sistemes quàntics tancats. Una part central d'aquest programa és entendre com els sistemes quàntics tancats inicialitzats lluny de l'equilibri poden compartir una dinàmica típica de la relaxació cap a l'equilibri tèrmic. Considerem aquí l'evolució cap a l'equilibri d'un model bidimensional que descriu la reacció de doble transferència de protons a la porfina. De les simulacions de dinàmica quàntica es desprèn que l'assoliment de l'equilibri té lloc molt ràpidament (~ 200 fs) per a estats inicials amb energies molt per sobre de la barrera síncrona. L'estat d'equilibri resultant mostra una forta deslocalització de la densitat de probabilitat dels protons que sorgeix de: (i) un estat inicial que consisteix en una superposició de molts estats vibracionals; (ii) la presència d'un mecanisme de desfasament molt eficaç. Aquest treball, que implica dos grups de l'IQTC i que va ser liderat pel Dr. Guillem Albareda, va ser seleccionat com a "PCCP 2020 Hot Article".

MXenes as promising catalysts for water dissociation.

J. D. Gouveia, Á. Morales-García, F. Viñes, F. Illas, J. R. B Gomes.

Appl. Catal. B 260 (2020) 118191.



MXenes effectively dissociate water suggesting them as catalysts for industrially relevant processes such as the water-gas shift reaction.

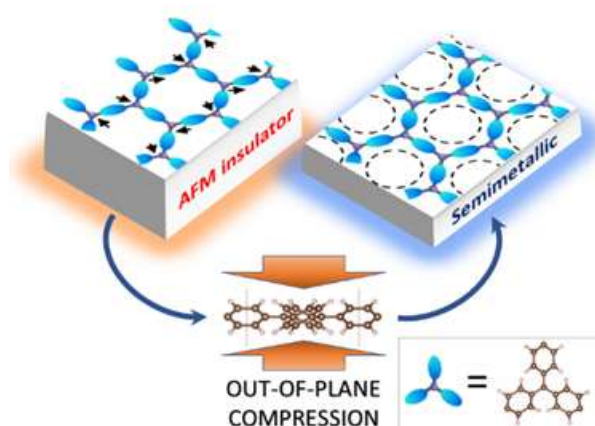
La investigació basada en la teoria funcional de densitat informa que M_2X ($M = \text{Ti, Zr, Hf, V, Nb, Ta, Cr, Mo, i W}$, mentre que $X = \text{C o N}$) MXenes adsorbeixen de forma exotèrmica l'aigua i faciliten molt la seva dissociació, amb un nivell baix. barreres energètiques. Aquest treball mostra la possible aplicació de MXenes com a catalitzadors heterogenis per a la dissociació d'aigua, cosa que suggereix eficaçment el seu potencial en processos rellevants com la reacció de desplaçament aigua-gas.

LÍNIA 2. NANOMATERIALS I NANOELÈCTRONICA

2D Hexagonal covalent organic radical frameworks as tunable correlated electron systems.

R. Santiago Piera, I. Alcon, J. Ribas Ariño, M. Deumal, I. P. R. Moreira, S. T. Bromley.

Adv. Funct. Mater., 31 (2020) 2004584.

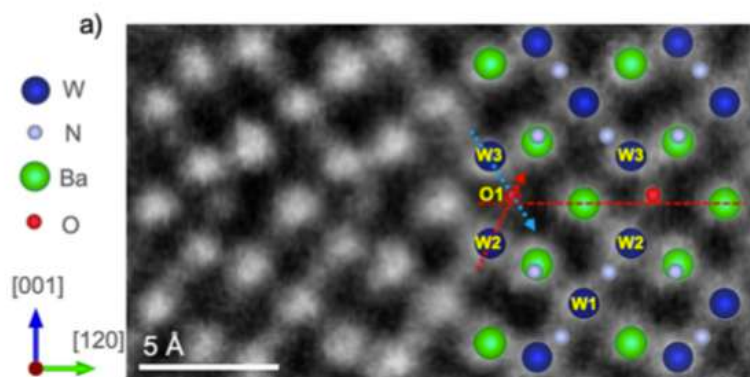


L'estudi demostra que la correlació d'electrons es pot sintonitzar simplement en *frameworks* de radicals orgànics covalents 2D ordenats hexagonalment (2D hex-CORFs) viables experimentalment i, per tant, els estableix com una classe de materials quàntics d'una sola capa versàtils.

Engineering polar oxynitrides: hexagonal perovskite BaWON₂.

J. Oró-Solé, I. Fina, C. Frontera, J. Gàzquez, C. Ritter, M. Cunquero, P. Loza-Alvarez, S. Conejeros, P. Alemany, E. Canadell, J. Fontcuberta, A. Fuertes.

Angew. Chem. Int. Ed., 59 (2020) 1-6.



Imatge de microscòpia de transmissió electrònica de rastreig amb resolució atòmica de BaWON₂ vist en la direcció de l'eix a. L'estructura superposada correspon al model P6₃mc refinat a partir de dades de difracció de raigs X de sincrotró.

Els oxinitrurs amb estructura perovskita coneguts formen cristalls centrosimètrics, en alguns casos amb permitivitats elevades que s'expliquen per la presència de dipols locals induïts per l'ordre parcial dels anions nitrur i òxid. En aquest treball descrivim per primer cop un oxinitrur, BaWON₂, amb estructura perovskita hexagonal que presenta el polítop polar 6H. Mesures de difracció de raigs X de sincrotró i neutrons i microscòpia electrònica de transmissió indiquen que el compost cristal·litza en el grup apolar P6₃mc, amb un ordre total dels anions òxid i nitrur en dues posicions diferents en capes BaX₃ amb empaquetaments cúbic i hexagonal. Un efecte sinèrgic de tipus Jahn-Teller de segon ordre, confirmat mitjançant càlculs *ab initio*, l'ordre aniònic, i les repulsions electrostàtiques entre cations W⁶⁺ indueixen distorsions considerables en dos octaedres amb una cara comuna que donen lloc a l'aparició de dipols ordenats a distàncies llargues i una polarització espontània al llarg de l'eix c.

Tuning Single-Molecule Conductance in Metalloporphyrin-Based Wires via Supramolecular Interactions.

A. C. Aragonès, A. Martín-Rodríguez, D. Aravena, J. Puigmartí-Luis, D. B. Amabilino, N. Aliaga-Alcalde, A. Gonzalez-Campo, E. Ruiz, I. Díez-Pérez.

Angew. Chem. Int. Ed., 59 (2020) 19193-19201.

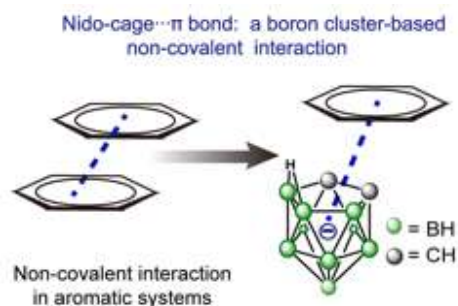


La Natura ha desenvolupat construccions supramoleculares que proporcionen excel·lents capacitats de transport de càrrega mitjançant matrius supramoleculares basades en metal·loporfirines. En aquest treball incorporem interaccions supramoleculares senzilles i d'inspiració natural mitjançant la complexació axial de metal·loporfirines en la formació d'un fil d'una sola molècula a nanoescala. Petits canvis estructurals en els enllaços de coordinació axial donen lloc a canvis dramàtics en les propietats de transport a través de la metal·loporfirina. L'augment de la flexibilitat d'un lligand piridina-4-il-metanotiol a causa d'un grup metil addicional, en comparació amb un enllaç més rígid de 4-piridinotiol, permet que el lligand piridina-4-il-metanotiol adopti una estructura apilada inesperada. Els càlculs DFT revelen una estructura d'unió molecular composta per una pila desplaçada dels dos lligands piridínics i l'anell de metal·loporfirina. En canvi, el lligand 4-mercaptopiridina més rígid presenta una coordinació octaèdrica més habitual del centre metàl·lic de la metal·loporfirina, que condueix a un camí de transport més llarg de menor conductància. Aquest treball s'obre a l'electrònica supramolecular, un concepte ja explotat en els organismes naturals.

Nido-Cage... π bond: a non-covalent interaction between boron clusters and aromatic rings and its applications.

H. Yan, D. Tu, J. Poater, M. Solà.

Angew. Chem. Int. Ed., 59 (2020) 9018-9025.

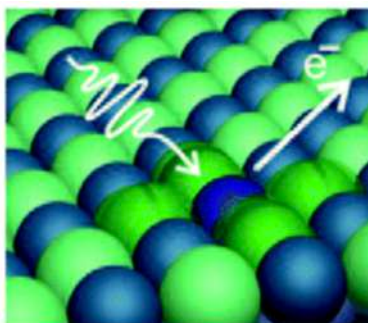


Les interaccions no covalents que impliquen esquelets multicèntrics multieletrons com ara els clústers de bor són poc comuns. Hem descobert l'enllaç nido-cage... π , una interacció no covalent, basat en el clúster de bor $C_2B_9H_{12}^-$ i un sistema π aromàtic. Els estudis de difracció de raigs X indiquen que l'enllaç nido-cage... π presenta geometries en desplaçament paral·lel o en forma de T. La distància de contacte entre el cage i l'anell π varia amb el tipus i el substituent de l'anell aromàtic. Els càlculs teòrics revelen que aquest enllaç nido-cage... π comparteix una naturalesa similar als enllaços convencionals anió... π o π ... π que es troben en els sistemes d'anells aromàtics clàssics. Aquesta interacció nido-cage... π induïx propietats fotofísiques variables, com ara l'emissió induïda per l'agregació i l'apagament causat per l'agregació en una molècula. Aquest treball ofereix una comprensió general cap a l'enllaç no covalent basat en clústers de bor i obre una porta per investigar-ne les propietats.

Limitations of the equivalent core model for understanding core-level spectroscopies.

P. S. Bagus, C. Sousa, F. Illas.

Phys. Chem. Chem. Phys. 22 (2020) 22617.



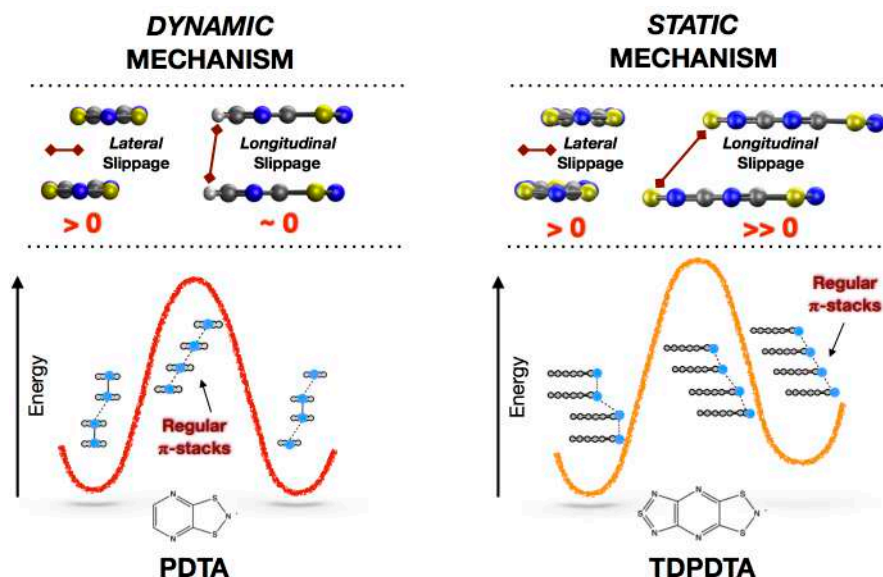
Esquema de la adsorció de llum i la excitació electrònica en una superfície, adreçada aquí per la teoria del forat del nucli i el model del nucli equivalent.

En aquest estudi es compara amb detall les estructures electròniques obtingudes de manera rigorosa per la teoria del forat del nucli i la del nucli equivalent, anomenada aproximació $Z + 1$, amb la intenció de determinar la validesa i utilitat de la darrera, revelant que serveix de manera qualitativa per les estructures inicials del forat del nucli, encara que falla en distingir entre contribucions d'estat inicial i final als desplaçaments d'energia d'enllaç, amb el conseqüent perill de una mala assignació, ja que el model $Z + 1$ exagera el paper dels estats finals.

Two different mechanisms of stabilization of regular π -stacks of radicals in switchable dithiazolyl-based materials.

T. Francese, S. Vela, M. Deumal, F. Mota, J.J. Novoa, M. Farnesi Camellone, S. Fabris, R.W.A. Havenith, R. Broer, J. Ribas-Arino.

J. Mater. Chem. C., 8 (2020) 5437.

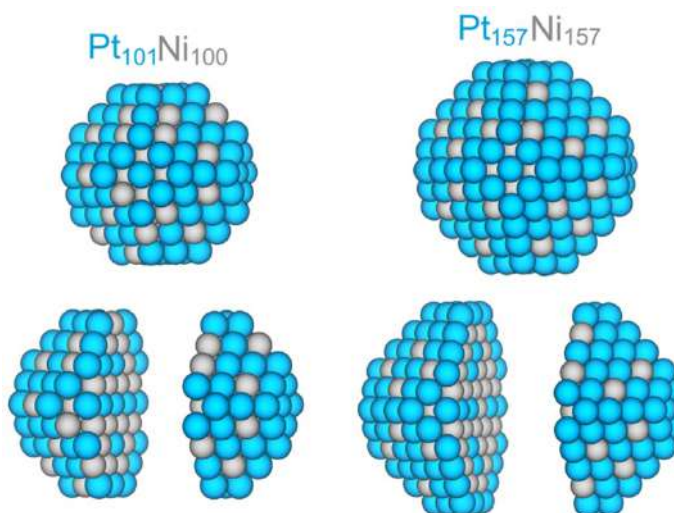


Aquest estudi computacional es va centrar en les propietats estructurals d'apilaments de tipus π regulars de radicals ditiadiazolil. Els apilaments π regulars de radicals plans $(\cdot\cdot A \cdots A \cdots A \cdots A \cdots A \cdot\cdot)_n$ constitueixen un motiu estructural molt important en ciència de materials perquè donen lloc a propietats tecnològicament rellevants. Ara bé, aquests apilaments regulars acostumen a ser inestables front processos de dimerització π , que condueixen a la formació de columnes dimeritzades $(\cdot\cdot A-A \cdots A-A \cdots A \cdots A \cdot\cdot)_n$, les quals van en detriment de les propietats conductores i magnètiques dels materials. Arran d'aquest estudi computacional, s'ha descobert que hi ha dos mecanismes diferents que confereixen estabilitat (almenys en un rang determinat de temperatures) als apilaments regulars de radicals. Quan els radicals d'una columna presenten un desplaçament lateral i longitudinal respecte dels seus radicals adjacents de la columna, la configuració d'apilament regular està associada a un mínim d'energia potencial. Per contra, quan els radicals d'una columna presenten únicament desplaçament lateral respecte dels seus radicals adjacents de la columna, l'apilament regular és el resultat d'una interconversió dinàmica entre dos apilaments dimeritzats degenerats: $(\cdot\cdot A-A \cdots A-A \cdots A \cdots A \cdot\cdot)_n \leftrightarrow (-A \cdots A-A \cdots A \cdot\cdot)_n$. L'existència de dos mecanismes d'estabilització d'apilaments π regulars té el seu origen en les característiques d'enllaç d'un dímer π aïllat de radicals i implica dues formes diferents de fer servir les transicions tipus spin-Peierls per al desenvolupament de materials commutables.

Irreversible structural dynamics on the surface of bimetallic PtNi alloy catalyst under alternating oxidizing and reducing environments.

I. Khalakhan, L. Vega, M. Vorokhta, T. Skála, F. Viñes, Y. V. Yakovlev, K. M. Neyman, I. Matolínová.

Appl. Catal. B: Environ., 264 (2020) 118476.



Ordenament atòmic òptim de nanocristalls de Pt:Ni 1:1 de 201 i 314 àtoms en condicions d'equilibri.

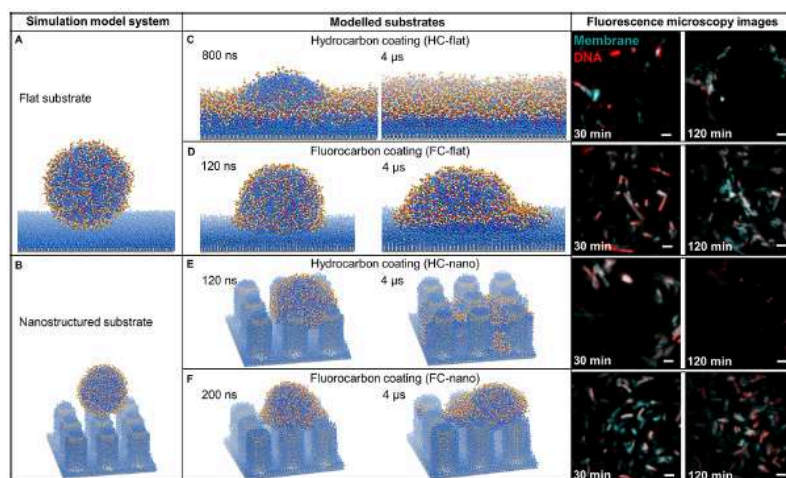
Aquest estudi combina experiments amb modelització computacional, aportant coneixements nous a l'estructura i propietats químiques de les superfícies de l'aliatge de PtNi sota condicions de reacció. Això ha permès entendre detalls de l'acció dels catalitzadors basats en PtNi en condicions d'operació, incloent la seva activitat catalítica a llarg termini en cel·les de combustible. La segregació superficial d'àtoms de Ni causada per medis reactius destrueix l'aliatge de PtNi a la superfície, el qual és de gran rellevància degut a la seva gran activitat electrocatalítica. Basant-se en els resultats obtinguts, va ser proposada una estratègia general per modificar les superfícies dels catalitzadors basats en PtNi. El pretractament redox de les nanopartícules bimetal·liques pot obrir un nou camí per a dissenyar catalitzadors de gran eficiència per a diversos processos catalítics.

LÍNIA 3. BIOMEDICINA I MATÈRIA TOVA

Direct and fast assessment of antimicrobial surface activity using molecular dynamics simulation and time-lapse imaging.

R. Sibilo, I. Mannelli, R. Reigada, C. Manzo, M. A. Noyan, P. Mazumder, V. Pruneri.

Anal. Chem., 92 (2020) 6795-6800.

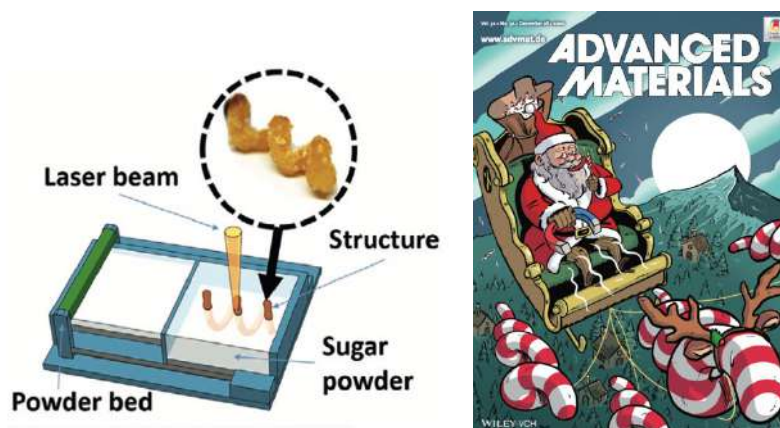


Amb l'alarmant augment de la resistència antimicrobiana, els estudis sobre les interaccions entre bacteris i superfícies són rellevants i oportuns. La microscòpia electrònica d'escombratge i el recompte de formació de colònies bacterianes són tècniques comunament utilitzades, però requereixen una preparació de mostres sofisticada i un llarg temps d'incubació. Aquí presentem un mètode directe basat en simulacions de dinàmica molecular de superfícies nanoestructurades que proporcionen prediccions *in silico*, complementades amb imatges de fluorescència en lapse de temps per estudiar les interaccions *in vivo* de bacteris a nivell membrana-substrat. Avaluem la seva efectivitat a l'hora de predir i analitzar estadísticament l'evolució temporal i la distribució espacial de bacteris prototípics (*E. coli*) en superfícies estructurades amb nanopilars. Hem observat modes d'interacció com la reorientació cel·lular, agrupació, danys a la membrana, inhibició del creixement i, en el cas extrem de nanopilars recoberts d'hidrocarburs, la desaparició cel·lular, validant els resultats de simulació obtinguts.

CANDYBOTS: a new generation of 3D-printed sugar-based transient small-scale robots.

S. Gervasoni, A. Terzopoulou, C. Franco, A. Veciana, N. Pedrini, J. T. Burri, C. de Marco, E. C. Siringil, X-Zh. Chen, B. J. Nelson, J. Puigmartí-Luis, S. Pané.

Adv. Mater., 32 (2020) 2005652.

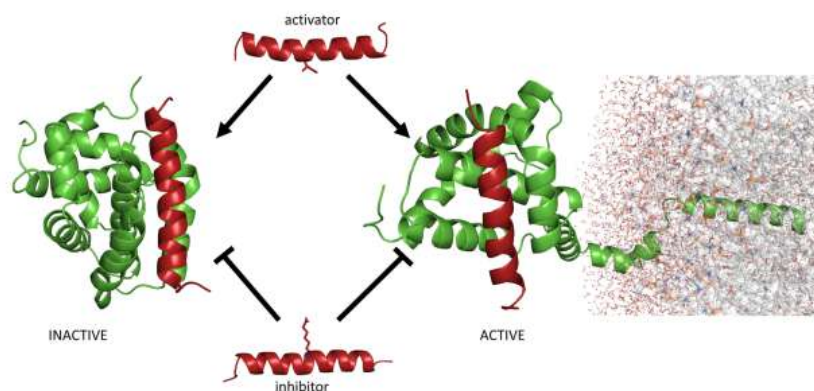


Els sucres es troben entre les principals fonts d'energia i formen part estructural en la majoria de formes de vida. A causa de la seva degradabilitat, reabsorbibilitat i biocompatibilitat, els sucres són materials molt desitjats en la fabricació de dispositius robòtics transitoris. Aquí introduïm una nova tecnologia per a la producció de compostos de sucre 3D, que pot permetre la generació de nous dispositius robòtics transitoris a petita escala.

Molecular determinants for the activation/inhibition of bak protein by BH3 peptides.

G. Vila-Julià, J. M. Granadino-Roldán, J. J. Perez , J. Rubio-Martinez.

J. Chem. Inf. Model., 60 (2020) 1631-1643.

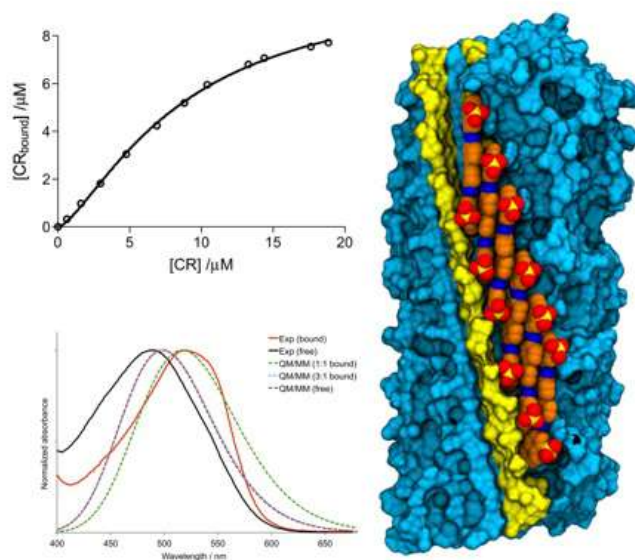


Determinants moleculars per a l'activació / inhibició de la proteïna Bak en la seva conformació activa / inactiva pels pèptids BH3.

Aquest treball presenta els resultats d'un estudi computacional que va tenir com a objectiu comprendre el comportament de la proteïna pro-apoptòtica Bak, que pertany a la família Bcl-2 de proteïnes. Els membres d'aquesta família comparteixen una gran similitud tant en termes estructurals com en els seus llocs d'unió. No obstant això, poden actuar evitant o promovent l'apoptosi. La inactivació de Bak produeix un augment de la proliferació en molts tumors. Per tant, determinar el mecanisme d'unió dels activadors a Bak i quines regions de la proteïna es modifiquen durant el procés d'activació és clau per desenvolupar noves molècules capaces d'imitar aquests activadors de Bak, utilitzant-les com a estratègies prometedores en el tractament de tumors que tenen Bak inactivat.

On the binding of congo red to amyloid fibrils.

A. Espargaró, S. Llabrés, S. J. Saupe, C. Curutchet, F. J. Luque, R. Sabaté.

Angew. Chem. Int. Ed. 59 (2020), 8104-8107.

El *Congo Red* s'uneix a les fibrilles amiloides amb l'eix llarg oblic a l'eix fibril·lar i el pla radial al nucli fibril·lar, seguint un mecanisme cooperatiu caracteritzat per la formació d'un complex estequiomètric 1: 1.

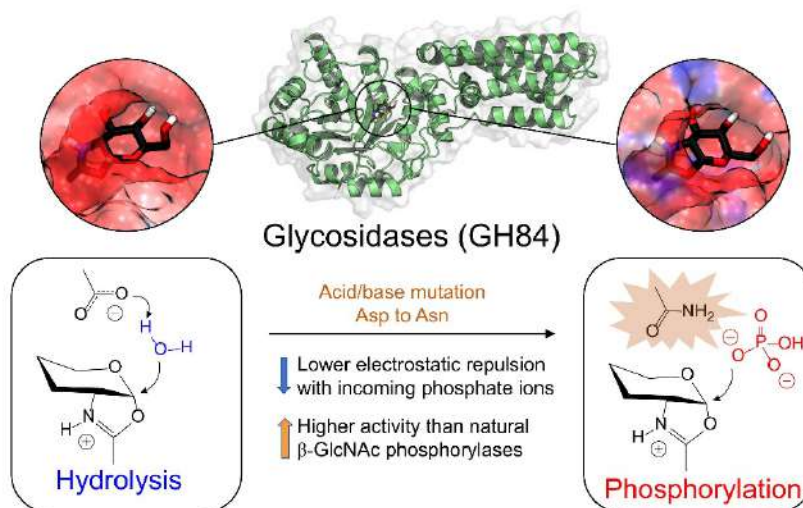
Els amiloides es caracteritzen per la seva capacitat d'enllaçar el *Congo red* (CR), un dels pigments específics d'amiloides més utilitzats. Les característiques estructurals d'aquesta unió s'han mantingut desconegudes durant anys, principalment a causa de la manca d'estructures amiloides resoltes a alta resolució. En els darrers anys, l'espectroscòpia RMN d'estat sòlid ha permès determinar les característiques estructurals d'amiloides com el domini de formació de prions HET-s (HET-s PFD) i la seva unió per CR. En aquest estudi, s'han combinat dades espectroscòpiques amb simulacions de *docking*, de dinàmica molecular i càlculs excitònics de mecànica quàntica/molecular per examinar i racionalitzar la unió de CR a amiloides. En contrast amb el model d'unió proposat anteriorment, els resultats han indicat que la unió de CR al HET-s PFD implica un procés cooperatiu que comporta la formació d'un complex amb estequiometria 1: 1.

A single point mutation converts GH84 O-GlcNAc hydrolases into phosphorylases.

Experimental and theoretical evidence.

D. Tezé, J. Coines, L. Raich, V. Kalichuk, C. Solleux, C. Tellier, C. André-Miral, B. Svensson, C. Rovira.

J. Am. Chem. Soc., 142 (2020) 2120.

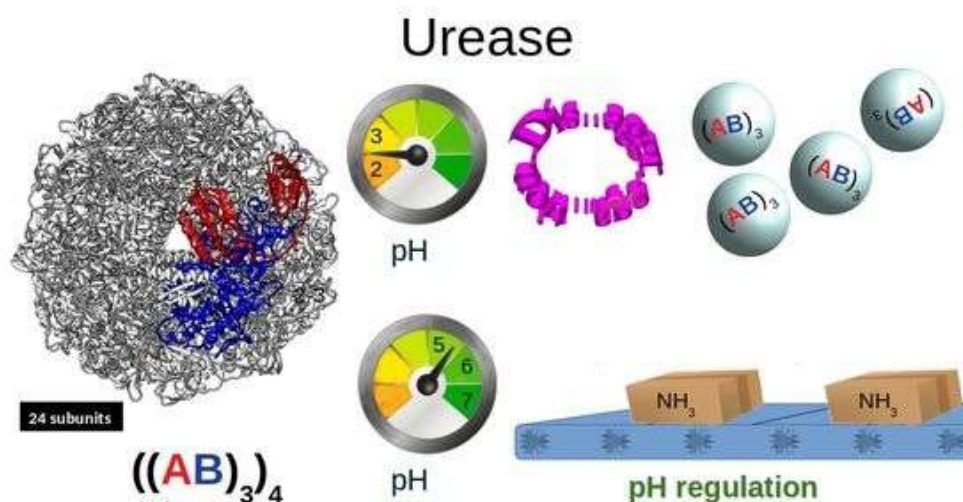


Dos dels grups més importants d'enzims que degraden els carbohidrats de la natura són les glicosil hidrolases (GHs) i les fosforilases (GPs). En aquest treball hem demostrat que una GH es pot convertir en una GP canviant només un aminoàcid del centre actiu: la mutació puntual d'un aspartat per una asparagina (Asp120Asn). Les simulacions de dinàmica molecular clàssica i de metadinàmica QM/MM mostren que la mutació fa canviar el potencial electrostàtic al centre actiu, la qual cosa fa disminuir dràsticament la barrera d'energia lliure de la reacció de fosforilació, que esdevé més afavorida que la d'hidròlisi. Els experiments cinètics mostren que, de fet, l'enzim amb la mutació és 10 vegades més actiu que les corresponents fosforilases naturals. Aquests resultats expandeixen la comprensió dels mecanismes moleculars de GHs i GPs i alhora obren la porta a la generació de variants enzimàtiques que podrien ser utilitzades per a la producció de valuosos glicòssids fosforilats a gran escala.

Effect of pH on the supramolecular structure of helicobacter pylori urease by molecular dynamics simulations.

H. L. Barazorda-Ccahuana, B. Gómez, F. Mas, S. Madurga.

Polymers, 12 (2020) 2713.



La producció d'amoniac de la Ureasa d' *Helicobacter pylori* permet la regulació del pH del medi.
A pHs molt àcids es produeix la desnaturalització de la proteïna.

L'efecte del pH sobre l'estructura supramolecular de la ureasa d' *Helicobacter pylori* es va estudiar mitjançant simulacions de dinàmica molecular a set pH diferents. Les distribucions de càrrega de la ureasa es van obtenir mitjançant simulacions Montecarlo en el formalisme de semi-gran canònic que assigna l'estat de càrrega de cada residu en funció del pK_a individual obtingut amb el programa PROPKA. S'ha analitzat l'efecte del pH sobre l'estabilitat de la proteïna mitjançant RMSD, el radi de gir, la superfície accessible al dissolvent, els enllaços d'hidrogen i els ponts salins. La ureasa catalitza la hidròlisi de la urea en 12 llocs actius que estan coberts per regions mòbils. La mobilitat d'aquestes regions s'incrementa a pH àcids. No obstant això, les condicions àcides extremes fan que la ureasa tingui el menor nombre d'interaccions estabilitzadores. Això inicia el procés de desnaturalització, en què les quatre subunitats $(\alpha\beta)_3$ de l'estructura global $((\alpha\beta)_3)_4$ de la ureasa comencen a separar-se.

III.2 LLISTA DE PUBLICACIONS

ARTICLES PUBLICATS

1. *First-Principles calculations on the adsorption behavior of amino acids on a titanium carbide MXene.*
J. D. Gouveia, G. Novell-Leruth, P. M. L. S. Reis, F. Viñes, F. Illas, J. R. B. Gomes.
ACS Appl. Bio Mater. 11 (2020) 8437.
2. *Unravelling the surface chemistry and structure in highly active sputtered Pt₃Y catalyst films for the oxygen reduction reaction.*
R. Brown, M. Vorokhta, I. Khalakhan, M. Dopita, T. Vonderach, T. Skála, N. Lindahl, I. Matolinová, H. Grönbeck, K. M. Neyman, V. Matolin, B. Wickman.
ACS Appl. Mater. Inter. 12 (2020) 4454-4463.
3. *Enhancing CO₂ electroreduction to ethanol on copper-silver composites by opening an alternative catalytic pathway.*
L. R. L. Ting, O. Piqué, S. Y. Lim, M. Tanhaei, F. Calle-Vallejo, B. S. Yeo.
ACS Catal. 10 (2020) 4059.
4. *Facile heterogeneously catalyzed nitrogen fixation by MXenes.*
J. D. Gouveia, Á. Morales-García, F. Viñes, J. R. B. Gomes, F. Illas.
ACS Catal. 10 (2020) 5049.
5. *A semiempirical method to detect and correct DFT-based gas-phase errors and its application in electrocatalysis.*
L. P. Grande-Marulanda, A. Rendón-Calle, S. Builes, F. Illas, M. T. M. Koper, F. Calle-Vallejo.
ACS Catal. 10 (2020) 6900.
6. *Critical hydrogen coverage effect on the hydrogenation of ethylene catalyzed by δ-MoC(001): an ab initio thermodynamic and kinetic study.*
C. Jimenez-Orozco, E. Flórez, F. Viñes, J. A. Rodriguez, F. Illas.
ACS Catal. 10 (2020) 6213.
7. *Multiscale study of the mechanism of catalytic CO₂ hydrogenation: role of the Ni(111) facets.*
P. Lozano-Reis, H. Prats, P. Gamallo, F. Illas, R. Sayós.
ACS Catal. 10 (2020) 8077.
8. *Substrate engagement and catalytic mechanisms of N-acetylglucosaminyltransferase.*
V. J. Darby, A. K. Gilio, B. Piniello, C. Roth, E. Blagova, R. Hubbard, C. Rovira, G. J. Davies, L. Wu.
ACS Catal. 10 (2020) 8590-8596.

9. *Elucidating the structure of ethanol-producing active sites at oxide-derived Cu electrocatalysts.*
O. Piqué, F. Viñes, F. Illas, F. Calle-Vallejo.
ACS Catal. 10 (2020) 10488.
10. *The catalytic reaction mechanism of the β -galactocerebrosidase enzyme deficient in Krabbe disease.*
A. Nin-Hill, C. Rovira.
ACS Catal. 10 (2020) 12091-12097.
11. *Activation of O_2 and H_2O_2 by lytic polysaccharide monooxygenases.*
B. Wang, Z. Wang, G. J. Davies, P. H. Walton, C. Rovira.
ACS Catal. 10 (2020) 12760-12769.
12. *MXenes: new horizons in catalysis.*
Á. Morales-García, F. Calle-Vallejo, F. Illas.
ACS Catal. 10 (2020) 13487.
13. *An epoxide intermediate in glycosidase catalysis.*
L. F. Sobala, G. Speciale, S. Zhu, L. Raich, N. Sannikova, A. J. Thompson, Z. Hakki, D. Lu, Y. Zhang, S. S. K. Abadi, A. R. Lewis, V. Rojas-Cervellera, G. Bernardo-Seisdedos, O. Millet, J. Jiménez-Barbero, A. J. Bennet, M. Sollogoub, C. Rovira, G. J. Davies, S. J. Williams.
ACS Cent. Sci. 6 (2020) 760-770.
14. *Vibrational analysis of manganese(II) oxalates hydrates: an in silico statistical approach.*
H. L. Barazorda-Ccahuana, M. Nedyalkova, I. Kichev, S. Madurga, B. Donkova, V. Simeonov.
ACS Omega 5 (2020) 9071-9077.
15. *New insights about the structural properties of κ -(BEDT-TTF) $_2$ X $_2$ (CN) $_3$ (X=Cu and Ag) spin liquids.*
P. Foury-Leylekian, V. Ilakovac, P. Fertey, V. Balédent, O. Milat, K. Miyagawa, K. Kanoda, T. Hiramatsu, Y. Yoshida, G. Saito, P. Alemany, E. Canadell, S. Tomic, J.-P. Pouget.
Acta Cryst. B76 (2020) 581-590.
16. *Microfluidic-assisted blade coating of compositional libraries for combinatorial applications: the case of organic photovoltaics.*
X. Rodríguez-Martínez, S. Sevim, X. Xu, C. Franco, P. Pamies-Puig, L. Córcoles-Guija, R. Rodríguez-Trujillo, F. Javier del Campo, D. Rodríguez-San-Miguel, A. deMello, S. Pané, D. B. Amabilino, O. Inganäs, J. Puigmartí-Luis, M. Campoy-Quiles.
Adv. Energy Mater. 10 (2020) 2001308.

17. *3D-printed soft magnetoelectric microswimmers for delivery and differentiation of neuron-like cells.*
M. Dong, X. Wang, X.-Z. Chen, F. Mushtaq, S. Deng, C. Zhu, H. Torlakcik, A. Terzopoulou, X.-H. Qin, X. Xiao, J. Puigmartí-Luis, H. Choi, Q.-D. Shen, B. J. Nelson, S. Pané.
Adv. Funct. Mater. 30 (2020) 1910323.
18. *2D hexagonal covalent organic radical frameworks as tunable correlated electron systems.*
R. Santiago, I. Alcón, J. Ribas-Ariño, M. Deumal, I. d. P. R. Moreira, S. T. Bromley.
Adv. Funct. Mater. (2020) 2004584.
19. *Enhancing long-term device stability using thin film blends of small molecule semiconductors and insulating polymers to trap surface-induced polymorphs.*
T. Salzillo, A. Campos, A. Babuji, R. Santiago, S. T. Bromley, C. Ocal, E. Barrena, R. Jouclas, C. Ruzie, G. Schweicher, Y. H. Geerts, M. Mas-Torrent.
Adv. Funct. Mater. 30 (2020) 2006115.
20. *Biodegradable metal-organic framework-based microrobots (MOFBOTs).*
A. Terzopoulou, X. Wang, X-Zh. Chen, M. Palacios-Corella, C. Pujante, J. Herrero-Martin, Dr. X-H. Qin, J. Sort, A. J. deMello, B. J. Nelson, J. Puigmartí-Luis, S. Pané.
Adv. Healthcare Mater. 9 (2020) 2001031.
21. *In search of chiral molecular superconductors: κ -[(S,S)-DM-BEDT-TTF]₂ClO₄ revisited.*
N. Mroweh, C. Mézière, F. Pop, P. Auban-Senzier, P. Alemany, E. Canadell, N. Avarvari.
Adv. Mater. 32 (2020) 2002811.
22. *CANDYBOTS: a new generation of 3D-printed sugar-based transient small-scale robots.*
S. Gervasoni, A. Terzopoulou, C. Franco, A. Veciana, N. Pedrini, J. T. Burri, C. de Marco, E. C. Siringil, X-Zh. Chen, B. J. Nelson, J. Puigmartí-Luis, S. Pané.
Adv. Mater. 32 (2020) 2005652.
23. *SERS barcode libraries: a microfluidic approach.*
S. Sevim, A. Sorrenti, S. Pané, A. J. deMello, J. Puigmartí-Luis.
Adv. Sci. 7 (2020) 1903172.
24. *Direct and fast assessment of antimicrobial surface activity using molecular dynamics simulation and time-lapse imaging.*
R. Sibilo, I. Mannelli, R. Reigada, C. Manzo, M. A. Noyan, P. Mazumder, V. Pruneri.
Anal. Chem. 92 (2020) 6795-6800.
25. *Engineering polar oxynitrides: hexagonal perovskite BaWON₂.*
J. Oró-Solé, I. Fina, C. Frontera, J. Gàzquez, C. Ritter, M. Cunqueiro, P. Loza-Alvarez, S. Conejeros, P. Alemany, E. Canadell, J. Fontcuberta, A. Fuertes.
Angew. Chem. Int. Ed. 59 (2020) 1-6.
26. *On the binding of congo red to amyloid fibrils.*
A. Espargaró, S. Llabrés, S. J. Saupe, C. Curutchet, F. J. Luque, R. Sabaté.
Angew. Chem. Int. Ed. 59 (2020) 8104-8107.

27. *The nido-cage $\cdots\pi$ bond: a non-covalent interaction between boron clusters and aromatic rings and its applications.*
H. Yan, D. Tu, J. Poater, M. Solà.
Angew. Chem. Int. Ed. 59 (2020) 9018-9025.
28. *Tuning single-molecule conductance in metalloporphyrin-based wires via supramolecular interactions.*
A. C. Aragonès, A. Martín-Rodríguez, D. Aravena, J. Puigmartí-Luis, D. B. Amabilino, N. Aliaga-Alcalde, A. Gonzalez-Campo, E. Ruiz, I. Díez-Pérez.
Angew. Chem. Int. Ed. 59 (2020) 19193-19201.
29. *Dioxygen binding and sensing proteins.*
D. A. Estrín, F. J. Luque, G. Ilangovan, J. L. Zweier.
Antioxid. Redox Signal. 32 (2020) 1151-1154.
30. *MXenes as promising catalysts for water dissociation.*
J. D. Gouveia, A. Morales-García, F. Viñes, F. Illas, J. R. B. Gomes.
Appl. Catal. B 260 (2020) 118191.
31. *Irreversible structural dynamics on the surface of bimetallic PtNi alloy catalyst under alternating oxidizing and reducing environments.*
I. Khalakhan, L. Vega, M. Vorokhta, T. Skála, F. Viñes, Y. V. Yakovlev, K. M. Neyman, I. Matolínová.
Appl. Catal. B 264 (2020) 118476.
32. *Critical effect of carbon vacancies on the reverse water gas shift reaction over vanadium carbide catalysts.*
A. Pajares, H. Prats, A. Romero, P. Ramírez de la Piscina, R. Sayós, N. Homs, F. Illas.
Appl. Catal. B 267 (2020) 118719.
33. *Substantial improvement of electrocatalytic predictions by systematic assessment of solvent effects on adsorption energies.*
A. Rendón-Calle, S. Builes, F. Calle-Vallejo.
Appl. Catal. B 276 (2020) 119147.
34. *Exploiting electrolyte confinement effects for the electrosynthesis of two-engine micromachines.*
M. Fernández-Barcia, B. Jang, Carlos C. J. Alcântara, U. Wolff, A. Gebert, M. Uhlemann, X. Chen, J. Puigmartí-Luis, J. Sort, E. Pellicer, S. Pané.
App. Mater. Today 19 (2020) 100629.
35. *Pathway selection as a tool for crystal defect engineering: s case study with a functional coordination polymer.*
A. Abrishamkar, S. Suárez-García, S. Sevim, Sh-X. Liu, S. Decurtins, G. Aromí, D. Aguilà, S. Pané, A. J. deMello, A. Rotaru, D. Ruiz-Molina, J. Puigmartí-Luis.
App. Mater. Today 20 (2020) 100632.

36. *The nano gold rush: graphynes as atomic sieves for coinage and Pt-group transition metals.*
S. Kim, P. Gamallo, F. Viñes, J. Y. Lee.
Appl. Surf. Sci. 499 (2020) 143927.
37. *Towards understanding the role of carbon atoms of transition metal surfaces: implications for catalysis.*
B. Martínez, O. Piqué, H. Prats, F. Viñes, F. Illas.
Appl. Surf. Sci. 513 (2020) 145765.
38. *Structural and kinetic features of aldehyde dehydrogenase 1A (ALDH1A) subfamily members, cancer stem markers active in retinoic acid biosynthesis.*
R. Pequerul, J. Vera, J. Giménez-Dejoz, I. Crespo, J. Coines, S. Porté, C. Rovira, X. Parés, J. Farrés.
Arch. Biochem. Biophys. 681 (2020) 108256.
39. *Assessing the viability of silicate nanoclusters as carriers of the anomalous microwave emission: a quantum mechanical study.*
A. M. Escatllar, S. T. Bromley.
Astron. Astrophys. 634 (2020) A77.
40. *Insights into the effect of the membrane environment on the three-dimensional structure-function relationship of antimicrobial peptides.*
W. J. Zamora, S. De Souza, F. Separovic, F. J. Luque.
Biophys. J. 118 (2020) 263A.
41. *Pharmacology and preclinical validation of a novel anticancer compound targeting PEPCK.*
M. Aragó, J. Moreno-Felici, S. Abás, S. Rodríguez-Arévalo, P. Hyroššová, A. Figueras, F. Viñals, B. Pérez, M. I. Loza, J. Brea, P. Latorre, J. A. Carrodegua, P. M. García-Rovés, C. Galdeano, T. Ginex, F. J. Luque, C. Escolano, J. C. Perales.
Biomed. Pharmacother. 121 (2020) 109601.
42. *Orbitals permit the interpretation of core-level spectroscopies in terms of chemistry.*
P. S. Bagus, F. Illas.
Catal. Lett. 150 (2020) 2457.
43. *Photocontrol of endogenous glycine receptors in vivo.*
A. M. J. Gomila, K. Rustler, G. Maleeva, A. Nin-Hill, D. Wutz, A. Bautista-Barrufet, X. Rovira, M. Bosch, E. Mukhametova, E. Petukhova, D. Ponomareva, M. Mukhamedyarov, F. Peiretti, M. Alfonso-Prieto, C. Rovira, B. König, P. Bregestovski, P. Gorostiza.
Cell Chem. Biol. 27 (2020) 1-9.
44. *Green synthesis of imine-based covalent organic frameworks in water.*
J. Á. Martín-Illán, D. Rodríguez-San-Miguel, C. Franco, I. Imaz, D. Maspoch, J. Puigmartí-Luis, F. Zamora.
Chem. Commun. n. 56 (2020) 6704-6707.

45. *Cleaner process and entrainer screening for bioethanol dehydration by heterogeneous azeotropic distillation.*
A. E. Plesu Popescu, J. L. Pellin, J. Bonet-Ruiz, J. Llorens.
Chem. Eng. Trans. 81 (2020) 829–834.
46. *Solvent screening and process simulation for vanillin production from lignin.*
A. E. Plesu Popescu, J. Torralba, J. Bonet-Ruiz, J. Llorens.
Chem. Eng. Trans. 81 (2020) 835–840.
47. *Distortion-controlled redshift of organic dye molecules.*
A. K. Narsaria, J. Poater, C. Fonseca-Guerra, A. W. Ehlers, T. A. Hamlin, K. Lammertsma, F. M. Bickelhaupt.
Chem. Eur. J. 26 (2020) 2080-2093.
48. *Coordinating ability of anions, solvents and gases towards ions of alkaline and alkaline-earth metals, transition metals, and lanthanides.*
S. Alvarez.
Chem. Eur. J. 26 (2020) 4350-4377.
49. *Highly positively charged, allyl-Pd crowns: cavity-pocket-driven interactions of fluoroanions.*
M. Ferrer, A. Gallen, A. Gutierrez, M. Martinez, E. Ruiz, Y. Lorenz, M. Engeser.
Chem. Eur. J. 26 (2020) 7847-7860.
50. *Metal-organic frameworks in motion.*
A. Terzopoulou, J. D. Nicholas, X-Zh. Chen, B. J. Nelson, S. Pané, J. Puigmartí-Luis.
Chem. Rev. 120 (2020) 11175–11193.
51. *Explaining Cu@Pt bimetallic nanoparticles activity based on NO adsorption.*
F. Viñes, A. Görling.
Chem. Eur. J. 26 (2020) 11478.
52. *Direct, enantioselective, and nickel(II) catalyzed reactions of N-azidoacetyl thioimides with trimethyl orthoformate: a new combined methodology for the rapid synthesis of lacosamide and derivatives.*
S. F. Teloxa, S. C. D. Kennington, M. Camats, P. Romea, F. Urpi, G. Aullón, M. Font-Bardia.
Chem. Eur. J. 26 (2020) 11540-11548.
53. *Trends in C-O and N-O bond scission on rutile oxides described using oxygen vacancy formation energies.*
H.-Y. Su, X. Ma, K. Sun, C. Sun, Y. Xu, F. Calle-Vallejo.
Chem. Sci. 11 (2020) 4119.
54. *HIV-1 envelope spike MPER: from a vaccine target to a new druggable pocket for novel and effective fusion inhibitors.*
F. J. Luque, M. J. Camarasa.
ChemMedChem 16 (2021) 105-107.

55. *Through-space polar- π interactions in 2,6-diarylthiophenols.*
J. Jian, J. Poater, R. Hammink, P. Tinnemans, C. J. McKenzie, F. M. Bickelhaupt, J. Mecinović.
ChemPhysChem 21 (2020) 1092-1100.
56. *Mechanism of biomolecular recognition of trimethyllysine by the fluorinated aromatic cage of KDM5A PHD3 finger.*
B. J. G. E. Pieters, M. H. M. Wuts, J. Poater, K. Kumar, P. B. White, J. J. A. G. Kamps, W. Sherman, G. J. M. Pruijn, R. S. Paton, T. Beumimg, F. M. Bickelhaupt, J. Mecinović.
Comm. Chem. 3 (2020) 69.
57. *First-principles study of the coexisting ferroelectric and ferromagnetic T properties of the $La_{0.75}Bi_{0.25}CrO_3$ compound.*
E. Martínez-Aguilar, H. Hmok, J. Ribas-Ariño, J. M. Siqueiros Beltrones.
Comput. Mater. Sci. 171 (2020) 109262.
58. *Effect of La^{3+}/Sr^{2+} ordering on the magnetic properties of $La_{2/3}Sr_{1/3}MnO_3$ T by first principles calculations.*
H. Hmok, E. Martínez-Aguilar, J. Ribas-Ariño, J. M. Siqueiros Beltrones, J. L. Sánchez Llamazares, O. Raymond-Herrera.
Comput. Mater. Sci. 177 (2020) 109575.
59. *Structural and functional properties of antarctic fish cytoglobins-1: cold-reactivity in multi-ligand reactions.*
D. Giordano, A. Pesce, S. Vermeyley S. Abbruzzetti, M. Nardini, F. Marchesani, H. Berghmans, C. Seira, S. Bruno, F. J. Luque, G. di Prisco, P. Ascenzi, S. Dewilde, M. Bolognesi, C. Viappiani, C. Verde.
Comput. Struct. Biotechnol. J. 168 (2020) 2132-2144.
60. *Combining chirality and hydrogen bonding in methylated ethylenedithio- tetrathiafulvalene primary diamide precursors and radical cation salts.*
N. Mroweh, F. Pop, C. Mézière, M. Allain, P. Auban-Senzier, N. Vanthuyne, P. Alemany, E. Canadell, N. Avarvari.
Cryst. Growth Des. 20 (2020) 2516-2526.
61. *Glycine residue twists HOMO...HOMO interactions in a molecular conductor.*
A. El-Ghayoury, C. Mézière, S. Simonov, L. Zorina, P. Auban-Senzier, P. Alemany, E. Canadell, P. Batail.
Cryst. Growth Des. 20 (2020) 3546-3554.
62. *Understanding the interplay of dispersion, charge-transfer and electrostatics in non-covalent interactions: the case of bromine carbonyl short contacts.*
J. Echeverría, J. D. Velásquez, S. Alvarez.
Cryst. Growth Des. 20 (2020) 7180-7187.
63. *The transition from 5f to 4d elements from a structural point of view.*
S. Alvarez.
CrystEngComm 22 (2020) 7229-7232.

64. *Mannosidase mechanism: at the intersection of conformation and catalysis.*
C. Rovira, A. Males, G. J. Davies, S. J. Williams.
Curr. Opin. Struct. Biol. 62 (2020) 79-92.
65. *Dysprosium-based complexes with a flat pentadentate donor: a magnetic and ab initio study.*
M. Fondo, J. Corredoira-Vazquez, A. M. Garcia-Deibe, S. Gomez-Coca, E. Ruiz, J. Sanmartin-Matalobos.
Dalton Trans. 49 (2020) 8389-8401.
66. *Spin dynamics in single-molecule magnets and molecular qubits.*
D. Aravena, E. Ruiz.
Dalton Trans. 49 (2020) 9916-9928.
67. *Fluorescent perylene pyridine complexes: an experimental and theoretical study.*
J. E. Expósito, G. Aullón, M. Bardají, J. A. Miguel, P. Espinet.
Dalton Trans. 49 (2020) 13326-13338.
68. *Thermodynamics-based process sustainability evaluation.*
P. S. Varbanov, H. H. Chin, A. E. Plesu Popescu, S. Boldyryev.
Energies 13 (2020) 2132.
69. *Phenoxylation of alkynes through mono- and dual activation using group 11 (Cu, Ag, Au) catalysts.*
M. Ramos, J. Poater, N. Villegas-Escobar, M. Gimferrer, A. Toro-Labbé, L. Cavallo, A. Poater.
Eur. J. Inorg. Chem. (2020) 1123-1134.
70. *Multigram scale synthesis of polycyclic lactones and evaluation of antitumor and other biological properties.*
L. Grau, M. Romero, C. Privat-Contreras, D. Presa, M. Viñas, J. Morral, K. Pors, J. Rubio-Martínez, M. D. Pujol.
Eur. J. Med. Chem. 185 (2020) 111807.
71. *N-benzyl 4,4-disubstituted piperidines as a potent class of influenza H1N1 virus inhibitors showing a novel mechanism of hemagglutinin fusion peptide interaction.*
S. De Castro, T. Ginex, E. Vanderlinden, M. Laporte, A. Stevaert, J. Cumella, F. Gago, M. J. Camarasa, F. J. Luque, L. Naesens, S. Velázquez.
Eur. J. Med. Chem. 194 (2020) 112223.
72. *The movement of a one-dimensional Wigner solid explained by a modified Frenkel-Kontorova model.*
W. Quapp, J.-Y. Lin, J. M. Bofill.
Eur. J. Phys. B 93 (2020) 227-244.
73. *Searching for effective antiviral small molecules against influenza A virus: a patent review.*
T. Ginex, F. J. Luque.
Expert Opin. Ther. Pat. 31 (2021) 53-66.

74. *Revisiting the role of hydrogen bonding in the strong dimer superexchange of a 2D copper(II) halide honeycomb-like lattice: structural and magnetic study.*
J. C. Monroe, M. A. Carvajal, M. Deumal, C. P. Landee, M. Rademeyer, M. M. Turnbull.
Inorg. Chem. 59 (2020) 6319-6331.
75. *[Co/Fe(α -Alkyl-tpdt)₂]²⁺: alkyl-substituted cobalt and iron bis-dithiolenethiophenic complexes.*
R. Silva, R. Santos, M. M. Andrade, I. C. Santos, J. T. Coutinho, L. Pereira, J. C. Waerenborgh, B. Vieira, J. Cirera, E. Ruiz, M. Almeida, D. Belo.
Inorg. Chem. 59 (2020) 9261-9269.
76. *Non-covalent interactions induced supramolecular architecture of Hg(NCS)₂ with 3-pyridinecarbaldehyde nicotinoylhydrazone.*
J. D. Velásquez, G. Mahmoudi, E. Zangrando, B. Miroslaw, D. A. Safin, J. Echeverría.
Inorg. Chim. Acta 509 (2020) 119700.
77. *Electronic, structural, and optical properties of Y₂WO₆, a host material for inorganic phosphors.*
P. Alemany, J. Llanos.
J. Alloy Compd. 819 (2020) 152958.
78. *Structural and vibrational behavior of cubic Cu_{1.80(3)}Se cuprous selenide, berzelianite, under compression.*
R. Chuliá-Jordan, D. Santamaría-Pérez, A. L. J. Pereira, B. García-Domene, R. Vilaplana, J. A. Sans, D. Martínez-García, Á. Morales-García, C. Popescu, C. Muehle, M. Jansen, F. J. Manjón.
J. Alloys Compd. 830 (2020) 154646.
79. *Energy transfer, structural and luminescent properties of the color tunable phosphor Y₂WO₆:Sm³⁺.*
D. Espinoza, N. L. Allan, R. Castillo, S. Conejeros, I. Brito, I. R. Martin, P. Alemany, J. Llanos.
J. Alloy Compd. 835 (2020) 155381.
80. *A single point mutation converts GH84 O-GlcNAc hydrolases into phosphorylases. Experimental and theoretical evidence.*
D. Tezé, J. Coines, L. Raich, V. Kalichuk, C. Solleux, C. Tellier, C. André-Miral, B. Svensson, C. Rovira.
J. Am. Chem. Soc. 142 (2020) 2120-2124.
81. *Biomimetic synthesis of sub-20 nm covalent organic frameworks in water.*
C. Franco, D. Rodríguez-San-Miguel, A. Sorrenti, S. Sevim, R. Pons, A. E. Platero-Prats, M. Pavlovic, I. Szilágyi, M. L. Ruiz Gonzalez, I. Imaz, M. Cano, D. MasPOCH, S. Pane, A. J. deMello, F. Zamora, J. Puigmartí-Luis.
J. Am. Chem. Soc. 142 (2020) 3540-3547.

82. *Molecular mechanisms of oxygen activation and hydrogen peroxide formation in lytic polysaccharide monooxygenases.*
N. G. S. McGregor, M. Artola, A. Nin-Hill, D. Linzel, M. Haon, J. Reijngoud, A. Ram, M.-N. Rosso, J. D. C. Codée, G. P. van Wezel, J.-G. Berrin, C. Rovira, H. S. Overkleeft, G. J. Davies.
J. Am. Chem. Soc. 142 (2020) 4648–4662.
83. *Growing and shaping metal-organic framework single crystals at the millimetre scale.*
A. Sorrenti, L. Jones, S. Sevim, X. Cao, A. J. deMello, C. Marti-Gastaldo, J. Puigmarti-Luis.
J. Am. Chem. Soc. 142 (2020) 9372-9381.
84. *Too persistent to give up: aromaticity in boron clusters survives radical structural changes.*
J. Poater, C. Viñas, I. Bennour, S. Escayola, M. Solà, F. Teixidor.
J. Am. Chem. Soc. 142 (2020) 9396-9407.
85. *Electronic control of spin-crossover properties in four-coordinate bis(formazanate) iron(II) complexes.*
F. Milocco, F. de Vries, I. M. A. Bartels, R. W. A. Havenith, J. Cirera, S. Demeshko, F. Meyer, E. Otten.
J. Am. Chem. Soc. 142 (2020) 20170-20181.
86. *Intermolecular resonance correlates electron pairs down a supermolecular chain: antiferromagnetism in K-Doped p-terphenyl.*
N. A. Gadjeva, P. Szirmai, O. Sági, P. Alemany, A. K. Bartholomew, I. Stone, S. Conejeros, D. W. Paley, R. Hernández Sánchez, B. Fowler, S. R. Peurifoy, B. Náfrádi, L. Forró, X. Roy, P. Batail, E. Canadell, M. L. Steigerwald, C. Nuckolls.
J. Am. Chem. Soc. 142 (2020) 20624–20630.
87. *Molecular determinants for the activation/inhibition of bak protein by BH3 peptides.*
G. Vila-Julià, J. M. Granadino-Roldán, J. J. Perez, J. Rubio-Martinez.
J. Chem. Inf. Model. 60 (2020) 1632–1643.
88. *Assessing the performance of mixed strategies to combine lipophilic molecular similarity and docking in virtual screening.*
J. Vázquez, A. Deplano, A. herrero, E. Gibert, E. Herrero, F. J. Luque.
J. Chem. Inf. Model. 121 (2020) 4231-4245.
89. *Nature of SrTiO₃/TiO₂(anatase) heterostructure from hybrid density functional theory calculations.*
G. Di Liberto, S. Tosoni, F. Illas, G. Pacchioni.
J. Chem. Phys. 152 (2020) 7138.
90. *On the use of DFT+ U to describe the electronic structure of TiO₂ nanoparticles: (TiO₂)₃₅ as a case study.*
Á. Morales-García, S. Rhatigan, M. Nolan, F. Illas.
J. Chem. Phys. 152 (2020) 244107.

91. *Comment on "exploring potential energy surface with external forces".*
W. Quapp, J. M. Bofill.
J. Chem. Theory Comput. 16 (2020) 811-815.
92. *Prediction of the n-octanol/water partition coefficients in the SAMPL6 blind challenge from MST continuum solvation calculations.*
W. J. Zamora, S. Pinheiro, K. German, C. Ràfols, C. Curutchet, F. J. Luque.
J. Comput. Aided Mol. Des. 34 (2020) 443-451.
93. *Activation strain analyses of counterion and solvent effects on the ion-pair S_N2 reaction of NH₂ and CH₃Cl.*
N. Savoo, J. Z. A. Laloo, L. Rhyman, P. Ramasami, F. M. Bickelhaupt, J. Poater.
J. Comput. Chem. 41 (2020) 317-327.
94. *Some mathematical reasoning on the artificial force induced reaction method.*
W. Quapp, J. M. Bofill.
J. Comput. Chem. 41 (2020) 629-634.
95. *Generalized gradient approximation adjusted to transition metals properties: key roles of exchange and local spin density.*
L. Vega, F. Viñes.
J. Comput. Chem. 41 (2020) 2598-2603.
96. *Fuzzy partitioning of clinical data for DMT2 patients.*
M. Nedyalkova, H. L. Barazorda-Ccahuana, C. Sarbu, S. Madurga, V. Simeonov.
J. Environ. Sci. Health A 55 (2020) 1450-1458.
97. *Mechanisms of carbon dioxide reduction on strontium titanate perovskites.*
U. Terranova, F. Viñes, N. H. de Leeuw, F. Illas
J. Mater. Chem. A 8 (2020) 9392.
98. *Ultra-high selectivity biogas upgrading through porous MXenes.*
H. Prats, H. McAloone, F. Viñes, F. Illas.
J. Mater. Chem. A 8 (2020) 12296.
99. *Two different mechanisms of stabilization of regular p-stacks of radicals in switchable dithiazolyl-based materials.*
T. Francese, S. Vela, M. Deumal, F. Mota, J. J. Novoa, M. Farnesi Camellone, S. Fabris, R. W. A. Havenith, R. Broer, J. Ribas-Arino.
J. Mater. Chem. C 8 (2020) 5437-5448.
100. *Bicyclic alfa-iminophosphonates as high affinity imidazoline I2 receptor ligands for Alzheimer's disease.*
S. Abàs, S. Rodríguez-Arévalo, A. Bagán, C. Griñán-Ferré, F. Vasilopoulou, I. Brocos-Mosquera, C. Muguruza, B. Pérez, E. Molins, F. J. Luque, P. Pérez-Lozano, S. Jonghe, D. Daelemans, L. Naesens, J. Brea, M. I. Loza, E. Hernández-Hernández, J. A. García-Sevilla, M. J. García-Fuster, M. Radan, T. Djikic, K. Nikolic, M. Pallàs, L. F. Callado, C. Escolano.
J. Med. Chem 63 (2020) 3610-3633.

101. *Centrally active multitarget anti-Alzheimer agents derived from the antioxidant lead CR-6.*
F. J. Pérez-Areales, E. Aso, M. Bartolini, A. De Simone, A. Espargaró, T. Ginex, R. Sabaté, B. Pérez, V. Andrisano, D. Puigoriol-Illamola, M. Pallàs, F. J. Luque, M. I. Loza, J. Brea, I. Ferrer, F. Ciruela, A. Messeguer, D. Muñoz-Torrero.
J. Med. Chem. 63 (2020) 9360-9390.
102. *Combining soft-SAFT and COSMO-RS modeling tools to assess the CO₂-SO₂ separation using phosphonium-based ionic liquids.*
G. Alonso, P. Gamallo, R. Sayós, F. Llovell.
J. Mol. Liq. 297 (2020) 111795.
103. *Cyclopropenylidene phosphoranes: rearrangement to azetidinylidene-methylphosphoniums.*
C. Dionel Mboyi, A. Poater, J. Poater, C. Duhayon, R. Chauvin.
J. Org. Chem. 85 (2020) 7452-7458.
104. *Assessment of the SCAN functional for spin-state energies in spin-crossover systems.*
J. Cirera, E. Ruiz.
J. Phys. Chem. A 124 (2020) 5053-5058.
105. *Single-molecule transport of fullerene-based curcuminoids.*
D. Dulic, A. Rates, E. Castro, J. Labra-Muñoz, D. Aravena, A. Etcheverry-Berrios, D. Riba-López, E. Ruiz, N. Aliaga-Alcalde, M. Soler, L. Echegoyen, H. S. J. van der Zant.
J. Phys. Chem. C 124 (2020) 2698-2704.
106. *Morphology of TiO₂ nanoparticles as a fingerprint for the transient absorption spectra: implications for photocatalysis.*
Á. Morales-García, R. Valero, F. Illas.
J. Phys. Chem. C 124 (2020) 11819.
107. *Predicting the effect of dopants on CO₂ adsorption in transition metal carbides: case study on TiC (001).*
M. López, F. Viñes, M. Nolan, F. Illas.
J. Phys. Chem. C 124 (2020) 15969.
108. *Neutral organic radical formation by chemisorption on metal surfaces.*
M. R. Ajayamukar, C. Moreno, I. Alcón, F. Illas, C. Rovira, J. Veciana, S. T. Bromley, A. Mugarza, M. Mas-Torrent.
J. Phys. Chem. Lett. 11 (2020) 3897-3904.
109. *Supported molybdenum carbide nanoparticles as hot hydrogen reservoirs for catalytic applications.*
M. Figueras, R. A. Gutiérrez, F. Viñes, P. J. Ramírez, J. A. Rodríguez, F. Illas.
J. Phys. Chem. Lett. 11 (2020) 8437.
110. *Effective 1D time-dependent Schrödinger equations for 3D geometrically correlated Systems.*
D. Pandey, X. Oriols, G. Albareda.
Materials 13 (2020) 3033-3045.

111. *Transition metal atoms encapsulated within microporous silicalite-1 zeolite: a systematic computational study.*
H. Prats, G. Alonso, R. Sayós, P. Gamallo.
Micropor. Mesopor. Mat. 308 (2020) 110462/1-8.
112. *Calculus of variations as a basic tool for modeling of reaction paths and localization of stationary points on potential energy surfaces.*
J. M. Bofill, W. Quapp.
Mol. Phys. 118 (2020) e1667035.
113. *Comparison of molecular recognition of trimethyllysine and trimethylthialysine by epigenetic reader proteins.*
J. C. J. Hintzen, J. Poater, K. Kumar, A. H. K. Al Temimi, B. J. G. E. Pieters, R. S. Paton, F. M. Bickelhaupt, J. Mecinović.
Molecules 25 (2020) 1918.
114. *Breakthroughs in medicinal chemistry: new targets and mechanisms, new drugs, new hopes–6.*
J. J. Vanden Eynde, A. A. Mangoni, J. Rautio, J. Leprince, Y.-T. Azuma, A. T. García-Sosa, C. Hulme, J. Jampilek, R. Karaman, W. Li, P. A. C. Gomes, D. Hadjipavlou-Litina, R. Capasso, A. Geronikaki, L. Cerchia, J.-M. Sabatier, R. Ragno, T. Tuccinardi, A. Trabocchi, J.-Y. Winum, F. J. Luque, K. Prokai-Tatrai, M. Spetea, M. Gütschow, I. Kosalec, C. Guillou, M. H. Vasconcelos, G. Kokotos, G. Rastelli, M. E. De Sousa, C. Manera, S. Gemma, S. Mangani, C. Siciliano, S. Galdiero, H. Liu, P. J. H. Scott, C. De Los Ríos, L. A. Agrofoglio, S. Collina, R. C. Guedes, D. Muñoz-Torrero.
Molecules 25 (2020) 119.
115. *Merging ligand-based and structure-based methods in drug discovery: an overview of combined virtual screening approaches.*
J. Vázquez, M. López, E. Gibert, E. Herrero, F. J. Luque.
Molecules 25 (2020) 4723.
116. *B₃₆ bowl-like structure as nanocarrier for sulfonamides: a theoretical study.*
S. Kamalinahad, A. Soltanabadi, P. Gamallo.
Monatsh. Chem. 151 (2020) 1785.
117. *Structure dependency of the atomic-scale mechanisms of platinum electro-oxidation and dissolution.*
T. Fuchs, J. Drnec, F. Calle-Vallejo, N. Stubb, D. J. S. Sandbeck, M. Ruge, S. Cherevko, D. A. Harrington, O. M. Magnussen.
Nat. Catal. 3 (2020) 754.
118. *Coordination control of a semicarbazide Schiff base ligand for spontaneous aggregation of a Ni₂Ln₂ cubane Family: influence of ligand arms and carboxylate bridges on the organization of the magnetic core.*
M. Biswas, E. C. Sañudo, J. Cirera, D. Ray.
New J. Chem. 44 (2020) 4812-4821.

119. *From micro- to macrorealism: addressing experimental clumsiness with semi-weak measurements.*
 D. Pandey, X. Oriols, G. Albareda.
New J. Phys. 22 (2020) 073047-073068.
120. *Diabetes mellitus type 2: exploratory data analysis based on clinical reading.*
 M. Nedyalkova, S. Madurga, D. Ballabio, R. Robeva, J. Romanova, I. Kichev, A. Elenkova, V. Simeonov.
Open Chem. 18 (2020) 1041-1053.
121. *Multivariate analysis for the classification of copper-lead and copper-zinc glasses.*
 D. Dimitrov, M. Nedyalkova, S. Madurga, L. Naneva, V. Simeonov.
Open Chem. 19 (2020) 1080-1085.
122. *Probing halogen- π versus CH- π interactions in molecular balance.*
 J. Jian, J. Poater, P. B. White, C. J. McKenzie, F. M. Bickelhaupt, J. Mecinović.
Org. Lett. 20 (2020) 7870-7873.
123. *Investigating the character of excited states in TiO₂ nanoparticles from topological descriptors: Implications for photocatalysis.*
 R. Valero, Á. Morales-García, F. Illas.
Phys. Chem. Chem. Phys. 22 (2020) 3017.
124. *Thermal spin crossover in Fe(II) and Fe(III). Accurate spin state energetics at the solid state.*
 S. Vela, M. Fumanal, J. Cirera, J. Ribas-Ariño.
Phys. Chem. Chem. Phys. 22 (2020) 4938-4945.
125. *Designing water splitting catalysts using rules of thumb: advantages, dangers and alternatives.*
 O. Piqué, F. Illas, F. Calle-Vallejo.
Phys. Chem. Chem. Phys. 22 (2020) 6797.
126. *Boosting the activity of transition metal carbides towards methane activation by nanostructuring.*
 M. Figueras, R. A. Gutiérrez, H. Prats, F. Viñes, P. J. Ramírez, F. Illas, J. A. Rodríguez.
Phys. Chem. Chem. Phys. 22 (2020) 7110.
127. *Analysis of the electronic delocalization in some isoelectronic analogues of B₁₂ doped with beryllium and/or carbon.*
 R. Islas, D. Inostroza, D. Arias-Olivares, B. Zúñiga-Gutiérrez, J. Poater, M. Solà.
Phys. Chem. Chem. Phys. 22 (2020) 12245-12259.
128. *Non-adiabatic quantum dynamics of the electronic quenching OH(A² Σ^+) + Kr.*
 P. Gamallo, A. Zanchet, F. J. Aoiz, C. Petrongolo.
Phys. Chem. Chem. Phys. 22 (2020) 17091-17105.

129. *Bulk (in)stability as a possible source of surface reconstruction.*
M. Figueras, A. Jurado, Á. Morales-García, F. Viñes, F. Illas.
Phys. Chem. Chem. Phys. 34 (2020) 19249.
130. *Quantum equilibration of the double-proton transfer in a model system porphine.*
G. Albareda, A. Riera, M. González, J.M. Bofill, I. de P. R. Moreira, R. Valero, I. Tavernelli.
Phys. Chem. Chem. Phys. 22 (2020) 22332-22341.
131. *Limitations of the equivalent core model for understanding core-level spectroscopies.*
P. S. Bagus, C. Sousa, F. Illas.
Phys. Chem. Chem. Phys. 22 (2020) 22617.
132. *Structural, electronic, and magnetic properties of Ni nanoparticles supported on the TiC(001) surface.*
P. Lozano-Reis, R. Sayós, J. A. Rodriguez, F. Illas.
Phys. Chem. Chem. Phys. 22 (2020) 26145.
133. *Preferential location of zirconium dopants in cerium dioxide nanoparticles and effects of doping on their reducibility: a DFT study.*
I. Z. Koleva, H. A. Aleksandrov, K. M. Neyman, G. N. Vayssilov.
Phys. Chem. Chem. Phys. 22 (2020) 26568-26582.
134. *Weak localization competes with the quantum oscillations in a natural electronic superlattice: the case of $\text{Na}_{1.5}(\text{PO}_2)_4(\text{WO}_3)_{20}$.*
K. K. Kolincio, O. Pérez, E. Canadell, P. Alemany, E. Duverger-Nédellec, A. Minelli, A. Bosak, A. Pautrat.
Phys. Rev. B. 101 (2020) 161117(R).
135. *MXenes atomic layer stacking phase transitions and their chemical activity.*
J. D. Gouveia, F. Viñes, F. Illas, J. R. B. Gomes.
Phys. Rev. Mater. 4 (2020) 54003.
136. *Comprehensive analysis of the influence of dispersion on group-14 rutile-type solids.*
Á. Morales-García, F. Illas.
Phys. Rev. Mater. 4 (2020) 73601.
137. *Quantum Zermelo problem for general energy resource bounds.*
J. M. Bofill, A. Sanz, G. Albareda, I. de P.R. Moreira, W. Quapp.
Phys. Rev. Res. 2 (2020) 033492-033502.
138. *Assessing $\text{Cu}_2\text{L}_2\text{X}_4$ dimeric moieties as ferromagnetic building blocks in double halide-bridged polymers ($\text{X} = \text{Cl}^-$, Br^- and $\text{L} = \text{benzamide}$). An experimental and computational study.*
S. Coetze, M. M. Turnbull, C. P. Landee, J. J. Novoa, M. Deumal, S. Vela, M. Rademeyer.
Polyhedron 185 (2020) 114603.

139. *Crystallization induced enhanced emission in two new Zn(II) and Cd(II) supramolecular coordination complexes with the 1-(3,4-Dimethylphenyl)-5-Methyl-1H-1,2,3-Triazole-4-carboxylate ligand.*
P. Narea, J. Cisterna, A. Cárdenas, P. Amo-Ochoa, F. Zamora, C. Climent, P. Alemany, S. Conejeros, J. Llanos, I. Brito.
Polymers 12 (2020) 1756.
140. *Effect of pH on the supramolecular structure of helicobacter pylori urease by molecular dynamics simulations.*
H. L. Barazorda-Ccahuana, B. Gómez, F. Mas, S. Madurga.
Polymers 12 (2020) 2713.
141. *Effect of nanoparticles in molten salts – MD simulations and experimental study.*
A. Svobodova-Sedlackova, C. Barreneche, G. Alonso, A. I. Fernández, P. Gamallo.
Renew. Energy 152 (2020) 208.
142. *Single molecule magnets of cobalt and zinc homo- and heterometallic coordination polymers prepared by a one-step synthetic procedure.*
N. Portolés-Gil, S. Gómez-Coca, O. Vallcorba, G. Marbán, N. Aliaga-Alcalde, A. López-Periago, J. A. Ayllón, C. Domingo.
RSC Adv. 10 (2020) 45090-45104.
143. *Structural, electronic and ferroelectric properties of $Zn_{93.75}M_{6.25}O$ ($M = Sr, Ba$): first-principles calculations.*
H. Hmok, E. Martínez-Aguilar, J. Ribas-Ariño, J. M. Siqueiros Beltrones.
Scr. Mater. 187 (2020) 8-12.

CAPÍTOLS DE LLIBRES I PROCEEDINGS

1. *Surface structural dynamics in bimetallic PtNi alloy catalyst under simulated operational conditions.*
I. Khalakhan, L. Vega, M. Vorokhta, T. Skála, F. Viñes, Y. V. Yakovlev, K. M. Neyman, I. Matolínová.
Elettra Highlights 2019-2020, p.118-119 (Trieste, Itàlia) 2020.
www.elettra.eu/science/highlights.html
2. *Magnetically and chemically propelled nanowire-based swimmers.*
J. Puigmartí-Luis, E. Pellicer, B. Jang, G. Chatzipirpiridis, S. Sevim, X.-Z. Chen, B. J. Nelson, S. Pané.
Magnetic Nano- and Microwires (Segona Edició) editat per M. Vázquez (Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials) 2020.
3. *Fractal Dimension (FD).*
P. M. Blanco, S. Madurga, A. Isvoran, L. Pitulice, F. Mas.
New Frontiers in Nanochemistry. Concepts, Theories, and Trends, vol. 1, cap. 16, p. 171-186 (sèries: Structural Nanochemistry) editat per M. V. Putz (Apple Academic Press, EUA) 2020.
4. *Fractal Kinetics (FK).*
F. Mas, L. Pitulice, S. Madurga, J. L. Garcés, E. Vilaseca, A. Isvoran.
New Frontiers in Nanochemistry. Concepts, Theories, and Trends, vol. 1, cap. 17, p. 187-199 (sèries: Structural Nanochemistry) editat per M. V. Putz (Apple Academic Press, EUA) 2020.
5. *Macromolecular Crowding (MC).*
A. Isvoran, L. Pitulice, E. Vilaseca, I. Pastor, S. Madurga, F. Mas.
New Frontiers in Nanochemistry. Concepts, Theories, and Trends, vol. 3, cap. 20, p. 307-317 (sèries: Sustainable Nanochemistry) editat per M. V. Putz (Apple Academic Press, EUA) 2020.
6. *Bohmian Approaches to Non-Adiabatic Molecular Dynamics.*
G. Albareda, I. Tavernelli.
Quantum Chemistry and Dynamics of Excited States: Methods and Applications editat per Leticia González, Roland Lindh (John Wiley & Sons, Ltd., EUA) 2020.

III.3 ALTRES ACTIVITATS

TESIS DOCTORALS 2020

1. *Catalytic reaction of β -galactocerebrosidase investigated by QM/MM ab initio metadynamics.*
Alba Nin Hill
Programa de doctorat: Química Teòrica i Modelització Computacional.
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.
Supervisor/s: C. Rovira.
Octubre 2020
2. *Computational modelling of TiO₂ and Mg-silicate nanoclusters and nanoparticles - crystallinity and astrophysical implications.*
Antoni Macià Escatllar
Programa de doctorat: Química Teòrica i Modelització Computacional.
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.
Supervisor/s: Francesc Illas, Stefan T. Bromley.
Setembre 2020.
3. *Coupling of binding and conformational equilibria in weak polyelectrolytes. Dynamics and charge regulation of biopolymers in crowded media.*
Pablo M. Blanco Andrés
Programa de doctorat: Química Teòrica i Modelització Computacional.
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.
Supervisor/s: S. Madurga, J. L. Garcés.
Novembre 2020.
4. *Desarrollos metodológicos en la exploración de la especie bioactiva en fármacos: Búsqueda de agentes antimaláricos.*
Antonio Viayna Gaza
Programa de doctorat: Biotecnologia.
Facultat de Farmàcia i Ciències de l'Alimentació, Universitat de Barcelona.
Supervisor/s: F. J. Luque.
Juny 2019.
5. *Quantum transport in solid state devices for terahertz frequency applications.*
Devashish Pandey
Programa de doctorat: Enginyeria Electrònica.
Departament d'Enginyeria Electrònica, Universitat Autònoma de Barcelona.
Supervisor/s: G. Alvareda, X. Oriols.
Desembre 2020.

TREBALL FINALS DE MÀSTER 2020

1. *Effects of the substituents on the crystal formation and stability of bis-1,2,3-Dithiazolyl radicals. A computational study.*

Denis Dyatlov

Màster: Química Teòrica i Modelització Computacional.

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Supervisor/s: Mercè Deumal, Jordi Ribas.

Juliol 2020.

2. *Mechanical and electronic properties of [1],[2]{1} – grazyne based on DFT calculations.*

Inga Zhukova

Màster: Química Teòrica i Modelització Computacional.

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Supervisor/s: Pablo Gamallo.

Juliol 2020.

3. *Silver and gold nanoalloys: interplay between chemical ordering and optical properties.*

Nicola Danielis

Màster: Corso di Laurea Magistrale in Chimica.

Dipartimento di Scienze Chimiche e Farmaceutiche, Università di Trieste.

Supervisor/s: Mauro Stener (Uni. Trieste), Konstantin Neyman.

Juliol 2020.

4. *Computational investigation of the binding properties of antibacterial photodrugs.*

Enrico Bisquolli

Màster: Corso di Laurea Magistrale in Biotecnologie Molecolari.

Dipartimento di Biologia, Università di Pisa.

Supervisor/s: Benedetta Mennucci (Uni. Pisa), Carles Curutchet.

Juliol 2020.

5. *Computer Aided Assessment of Renewable Resources.*

Luis Axel Gortázar Marina

Màster: Enginyeria Ambiental.

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Supervisor/s: J. Bonet, A. E. Plesu.

Juliol 2020.

6. *Introducing Eco-gamma: a novel environmental impact index for water quantity and quality evaluation.*

Márcio Quezada Prado

Màster: Enginyeria Ambiental.

Facultat de Química, Universitat de Barcelona.

Supervisor/s: J. Bonet, A. E. Plesu.

Juliol 2020.

7. *Development status of global marine wind energy and contribution to the future development in Spain.*
Marc Llin Brosa
Màster: Enginyeria Ambiental.
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.
Supervisor/s: J. Bonet, A. E. Plesu.
Juliol 2020.
8. *Host-guest interaction in spin-crossover [Fe₄] metal-organic cages.*
Laia Navarro Maestro
Màster: Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.
Supervisor/s: J. Cirera.
Juliol 2020.
9. *Study of structural and electronic properties of spherical TiO₂ nanoparticles by molecular dynamics and DFT calculations.*
Daniel Torrens Gonzalez
Màster: Química Teòrica i Modelització Computacional.
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.
Supervisor/s: S. T. Bromley, A. Morales.
Juliol 2020.
10. *Surrogate model for chemical absorbents mixtures for CO₂ capture.*
Antonio Peiró Jiménez
Màster: Enginyeria Ambiental.
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.
Supervisor/s: J. Bonet, A. E. Plesu.
Setembre 2020.
11. *Stretching of hyaluronic acid at the single molecule level.*
Sílvia Sodric Hidalgo
Màster: Química de Materials Avançats.
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.
Supervisor/s: S. Murga.
Setembre 2020.
12. *Designing new tunable materials for organic electronic devices.*
Kilian J. tglar Lozano
Màster: Modelització Computacional Atomística i Multiescala en Física, Química i Bioquímica.
Facultat de Química, Universitat de Barcelona.
Supervisor/s: Stefan Bromley, Jordi Ribas.
Setembre 2020.

13. *Time-optimal control of quantum systems: a solution to the quantum Zermelo problem.*
Lluc Garcia-Gonzalo
Màster: Fotònica.
Facultat de Física, Universitat de Barcelona.
Supervisor/s: G. Albareda.
Octubre 2020.

PARTICIPACIÓ A CONGRESSOS 2020

Congreso Internacional y III Congreso Latinoamericano de Química, Física y Biología Computacional

Arequipa (Peru) 20-24 Gener 2020

Complexation and dynamics of polyelectrolytes in environmental and physiological media
F. Mas, P. M. Blanco, J. L. Garcés, S. Madurga

Simulation and prediction of properties of polyelectrolytes and proteins
S. Madurga, H. L. Barazorda-Ccahuana, P. M. Blanco, M. Nedyalkova, J. L. Garcés F. Mas

Onzena Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans

Vilanova i la Geltrú (Espanya) 27-28 Gener 2020

Unravelling the molecular mechanism of CO₂ hydrogenation on Ni(111): reverse water gas shift versus Sabatier reaction
P. Lozano, H. Prats, P. Gamallo, F. Illas, R. Sayós

Efecte del pH en l'estudi conformacional de les proteïnes intrínscament desestructurades
C. Privat, S. Madurga, F. Mas, J. Rubio

Analysis of supramolecular structure of helicobacter pylori urease extracellular at different pHs by molecular dynamics simulation
S. Madurga, H. L. Barazorda-Ccahuana, P. M. Blanco, M. Nedyalkova, J. L. Garcés F. Mas

Overcoming Mott insulation by means of external mechanical compression in tam-based corfs
R. Santiago

III International Workshop on Chemistry of Group 11 Elements

Caparica (Portugal) 30-31 Gener 2020

Degradation of silver(I) compounds with N-heterocyclic carbenes into saline water (comunicació oral)
A. Cebrián, G. Aullón

The SPIRITS International Symposium

Kyoto (Japó) 6 Febrer 2020

Shaping self-assembled mesoscale (bio)materials with microengineering (conferència convidada)

J. Puigmartí-Luis

International Conference on Computational Materials Science for Nanoscale Modelling – COST Action CA18234

Nàpols (Itàlia) 11-13 Febrer 2020

Structural and Electronic Properties of Realistic TiO₂ Nanoparticles (comunicació oral).

À. Morales-García

Structural and electronic structure methods and models for water splitting with nanocrystals: where we are and where we go (comunicació oral)

F. Illas

Modelling nanocomposite materials for catalysis: from ceria to bimetallic crystallites (conferència convidada)

K. M. Neyman

Symposium on Size Selected Clusters (S3C)

Davos (Suïssa) 23 Febrer 2020

How hot are clusters in experiment? Insights from modelling finite temperature infrared spectras (conferència convidada)

S. T. Bromley

13th European School on Molecular Nanoscience (ESMoNa)

online (Espanya) 3-5 Juny 2020

Improving slow spin relaxation properties by encapsulation (conferència convidada)

E. Ruiz

nanoGe Online Meeting Conference

online (Espanya) 9-10 Juny 2020

Towards affordable yet accurate computational models for CO₂ electroreduction (comunicació oral)

F. Calle-Vallejo

Workshop on ML potentials and long-range interactions

online (Alemanya) 29 Juny – 1 Juliol 2020

A. Bruix (co-organització)

<https://www.department.ch.tum.de/index.php?id=4627>

International Conference “New directions for modeling nanocrystal catalysts”, Meeting of the COST Action CA18234

online (Israel) 7 Juliol 2020

DFT modelling of metal nanoparticles in catalysis (conferència convidada)

K. M. Neyman

23rd Conference on Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction, PRES'20

online (Xina) 17-21 Agost 2020

Solvent screening and process simulation for vanillin production from lignin (comunicació oral)

A. E. Plesu, J. Torralba, J. Bonet-Ruiz, J. Llorens

Cleaner process and entrainer screening for bioethanol dehydration by heterogeneous azeotropic distillation (pòster)

A. E. Plesu, J. L. Pellin, J. Bonet-Ruiz, J. Llorens

71st Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry

online (Espanya) 30 Agost – 4 Setembre 2020

Towards a comprehensive understanding of Pt-based electrocatalysis (comunicació oral)

F. Calle-Vallejo

15th Conference on Sustainable Development of Energy, Water and Environment Systems (SDEWES)

online (Alemanya) 1-5 Setembre 2020

Wastewater as source of sustainable secondary raw materials (comunicació oral)

A. E. Plesu, J. Bonet-Ruiz, P. S. Varbanov, J. J. Klemes

AEBIN Photochemistry School 2020

online (Espanya) 7-9 Setembre 2020

Unravelling Calmodulin conformational ensemble from combined Molecular Dynamics and FRET simulations (pòster)

D. Gonzalo, C. Curutchet

Dual classical/quantum MD strategy for the determination of site energies in photosynthetic complexes: Application to the PC645 antenna (pòster)

B. Ozaydin, M. Corbella, L. Cupellini, G. D. Scholes, C. Curutchet

Electrochemistry Undercover

online (Espanya) 23-24 Setembre 2020

Kinetics of the Hydrogen Evolution Reaction on MXenes (pòster)

M. López, F. Viñes, F. Calle-Vallejo, K. S. Exner, F. Illas

VI International School-Conference “Catalysis: from Science to Industry”

Tomsk (Rússia) 6-10 Octubre 2020

Session 6 “Physical-chemical fundamentals of catalysis / Industrial implementation of catalytic processes” (chairman)

K. M. Neyman

Modelling of catalytic nanomaterials using Density Functional Theory (conferència plenària)

K. M. Neyman

2nd Transnational Access Visitors Meeting (TAM)

online (Espanya) 22-23 Octubre 2020

Modulation of CO₂ adsorption on cation doped TiC (comunicació oral)

M. López, F. Viñes, M. Nolan, F. Illas

4th Sustainable Process Integration Laboratory Scientific Conference: Energy, Water, Emission & Waste in Industry and Cities (SPIL'20)

online (República Txeca) 18-20 Novembre 2020

Assessment of alkanolamines for CO₂ capture by chemical absorption (comunicació oral)

A. E. Plesu, A. Gonzalez, T. Peiró, J. Bonet-Ruiz, J. Llorens

III Tesimarató de Química

Barcelona (Espanya) 19 Novembre 2020

Disseny racional de materials fotoactius basats en TiO₂ per a la producció d'hidrogen (comunicació oral)

M. R. Poo, S. T. Bromley, Á. Morales-García

CataLight Young Scientist Symposium

online (Espanya) 19 Novembre 2020

Crystal facet engineering for tailoring photoactive TiO₂ nanoparticles (comunicació oral)

Á. Morales-García, A. Macià, S. T. Bromley, F. Illas

Catalysis Talks Webinar Series

online (Espanya) 25 Novembre 2020

Feasibility of MXenes to catalyze the dissociation of nitrogen (comunicació oral)

Á. Morales-García, D. Gouveia, F. Viñes, J.R.B. Gomes, F. Illas

First International Symposium on the DFT Modelling of Materials Relevant for Water Splitting

online (Espanya) 11 Desembre 2020

F. Viñes, F. Illas, K. Neyman (organització)

DFT modelling of structure and reducibility of cerium dioxide nanoparticles doped by zirconium (conferència convidada)

I. Z. Koleva, H. A. Aleksandrov, K. M. Neyman, G. N. Vayssilov

Beijing Institute of Technology (BIT)

online (Xina) 18 Desembre 2020

Exploiting controlled reaction-diffusion conditions for materials synthesis (conferència convidada)

J. Puigmartí-Luis

ESTADES EN CENTRES EXTERNS

Ribas, J.

Center for Computational Science and E-Systems, Japan Atomic Energy Agency, Chiba (Japó)

Investigador visitant UB convidat pel Dr. Motoyuki Shiga.
Gener 2020

PARTICIPACIÓ EN PROJECTES D'INVESTIGACIÓ _____

Institute of Theoretical and Computational Chemistry (Excelence Unit "María de Maeztu").

E. Ruiz, Universitat de Barcelona

MdM-2017-0767, 2018-2021

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 2.000.000 €

Magnetically steerable wireless Nanodevices for the tarGeted delivery of therapeutlc agents in any vascular rEgion of the body (ANGIE).

J. Puigmartí-Luis, Universitat de Barcelona

952152, 2021-2025

Comissió Europea

Import: 4.000.000 € from where 555.000 € to University of Barcelona

Ultra-versatile Structural PRINTing of amorphous and tuned crystalline matter on multiple substrates (SPRINT).

J. Puigmartí-Luis, Universitat of Barcelona

801464, 2018-2022

Comissió Europea

Import: 2.999.997,50 € (435.375 € per a ETH Zürich i ara a la UB)

Microfluidic Crystal Factories (μ -CrysFact): a breakthrough approach for crystal engineering.

J. Puigmartí-Luis, Universitat de Barcelona

677020, 2016-2021

Consell per a la Recerca Europea (ERC)

Import: 1.814.128 €

Functional 2D porous crystalline materials (2DMats).

J. Puigmartí-Luis, Universitat de Barcelona

181988, 2019-2023

Fons Nacional Suïa

Import: CHF 600.000, ara 300,000.00 € a la Universitat de Barcelona

New approaches to nano-engineer MOF films for electronic and biotechnology applications (M-O-Films).

J. Puigmartí-Luis, Universitat de Barcelona

2019-2023

Fundació nanociències: Université Grenoble Alpes

Import: 351.000 €

Estructura electrónica y propiedades en moléculas y sólidos inorgánicos.

E. Ruiz, Universitat de Barcelona

PGC2018-093863-B-C21, 2019-2021

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 210.000 €

Estructura electrónica y propiedades de moléculas y sólidos inorgánicos.

P. Alemany, K. Neyman, Universitat de Barcelona

PGC2018-093863-B-C22, 2019 – 2021

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 121.000 €

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

F. Sagués, Universitat de Barcelona

FIS2016-78507-C2-1-P, 2017 – 2020

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Diseño racional de nuevos catalizadores heterogeneos, electrocatalizadores y fotocatalizadores para la producción de energía limpia sostenible a través de la conversión de H₂.

F. Illas, F. Viñes, Universitat de Barcelona

RTI2018-095460-B-I00/AEI/FEDER, 2019 – 2021

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 229.900 €

Química Computacional Aplicada para la captura, separación y conversión de CO₂ en combustibles ligeros.

R. Sayós, P. Gamallo, Universitat de Barcelona

RTI2018-094757-B-I00/AEI/FEDER, 2019 – 2021

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 85.426 €

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/AEI/FEDER, 2018-2021

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/AEI/FEDER, 2018-2020

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 104.060 €

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

C. Curutchet, Universitat de Barcelona

CTQ2017-89924-P/AEI/FEDER, 2018-2020

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 65.340 €

Producción de bio-plásticos a partir de la fracción orgánica de residuos municipales.

J. Mata, J. Llorens, Universitat de Barcelona

CTM2016-76275-R, 2016-2020

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 139.150 €

Computational Materials Science Laboratory.

F. Illas, Universitat de Barcelona

2017 SGR 13, 2017-2021

Agència de Gestió d'Ajudes Universitàries i de Recerca (AGAUR)

Import: 68.000 €

Grup de Modelització i disseny de sistemes químics radicalaris.

J. M. Bofill, Universitat de Barcelona

2017 SGR 348, 2017-2021

Agència de Gestió d'Ajudes Universitàries i de Recerca (AGAUR)

Import: 20.000 €

Grup de Bioinformàtica Integrativa.

M. Cascante, Universitat de Barcelona

2017 SGR 1033, 2017-2021

Agència de Gestió d'Ajudes Universitàries i de Recerca (AGAUR)

Grup d'Estructura i Funció en Macromolècules.

C. Rovira, Universitat de Barcelona

2017 SGR 1189, 2017-2021

Agència de Gestió d'Ajudes Universitàries i de Recerca (AGAUR)

Grup d'Estructura Electrònica.

S. Alvarez, Universitat de Barcelona

2017 SGR 1289, 2017-2021

Agència de Gestió d'Ajudes Universitàries i de Recerca (AGAUR)

Import: 44.480 €

Grup de Biologia Computacional i Disseny de Fàrmacs.

F. J. Luque, Universitat de Barcelona

2017 SGR 1746, 2017-2021

Agència de Gestió d'Ajudes Universitàries i de Recerca (AGAUR)

Import: 65.896 €

FRAGments training NETwork.

X. Barril, Universitat de Barcelona

FRAGNET, 2016-2020

Innovative Training Networks (UE-ITN)

Import: 421.930 €

Alianza de Centros Severo Ochoa y Unidades María de Maeztu.

Luis Serrano, Centro de Regulación Genómica, E. Ruiz, Universitat de Barcelona

RED2018-102506-E, 2019-2021

Ministerio de Ciencia, Investigación y Universidades

Import: 60.000 €

Ciencia Molecular sobre superficies: Síntesis y Funcionalidad.

José Ignacio Pascual, Nanogune, J. Echeverría, Universitat de Barcelona

RED2018-102833-T, 2019-2021

Ministerio de Ciencia, Investigación y Universidades

Import: 15.000 €

Theoretical study on the receptor-cannabinoid affinities and dynamics.

C. Curutchet, Universitat de Barcelona

2018 DI 043, 2019-2021

Generalitat de Catalunya (GENCAT)

Import: 33.960 €

Ramón y Cajal Programme

Jorge Echevarría, Universitat de Barcelona

RYC-2017-22853, 2019-2020

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 6.000 €

Interacciones no covalentes y su explotación a escala nanoscópica.

Jorge Echeverría, Universitat de Barcelona

PID2019-109119GA-I00, 2020-2023

Ministerio de Ciencia, Investigación y Universidades

Import: 68.000 €

Estudio teórico y espectroscópico de moléculas orgánicas birradicalarias relevantes para la química bioorgánica y los materiales moleculares multifuncionales.

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

PID2019-109518GB-I00, 2020-2022

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 60.500,00 €

Modelado de interacciones no-covalentes y cooperatividad en pares de bases de ADN (no)naturales y en cuadruplexes de guanina.

Jordi Poater, Universitat de Barcelona

PID2019-106830GB-I00, 2020-2023

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 60.500,00 €

Ramón y Cajal Programme.

Jordi Ciera, Universitat de Barcelona

RYC-2018-024692-I, 2020-2021

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 40.000 €

Beatriu de Pinós Beca Postdoctoral Grant.

Silvia Gómez-Coca, Universitat de Barcelona

2017 BP 00080, 2018-2020

Agència de Gestió d'Ajudes Universitàries i de Recerca (AGAUR)

Import: 92.000 €

Beatriu de Pinós Postdoctoral Grant.

Albert Bruix, Universitat de Barcelona

2018 BP 00190, 2020-2023

Agència de Gestió d'Ajudes Universitàries i de Recerca (AGAUR)

Import: 144.300 €

Captura de CO₂ emitido por vehiculos basados en motores de combustión, mediante adsorción en sólidos porosos.

X. Gimenez, P. Gamallo, Universitat de Barcelona

IDI-20190124 (310437), 2019-2021

Centro para el Desarrollo Tecnológico e Industrial (CDTI), Recam Laser S.L.

Import: 146.000 €

Tubulin dynamics and interactions to face neurotoxicity: a multidisciplinary approach for training and research (TubInTrain).

M. Cascante, Universitat de Barcelona

860070 – H2020-MSCA-ITN-2019, 2019- 2023

Unió Europea

Import: 426.210 €

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

Programa Europeu H2020

Reposicionament basat en lligaNd (LBRS) de un compost fenòlic amb activitat anti-amiloidogènica: Una prova de concepte?

F. J. Luque, Universitat de Barcelona

2019LLAV00016, 2020-2021

Agència de Gestió d'Ajudes Universitàries i de Recerca (AGAUR)

Import: 20.000 €

Recuperació i valorització de recursos de digestats urbans en el marc de l'economia circular (DIGESTAKE).

J. F. Garcia, Universitat de Barcelona

COMRDI16-1-0061-01, 2017 – 2020

Acció, Agència per a la Competitivitat de l'Empresa Catalana

Import: 117.934 €

Energy and charge transfer by non-orthogonal configuration interaction

C. Sousa, M. Llunell, Universitat de Barcelona

CHM154, 2019-2020

Oak Ridge Leadership Computing Facility (EUA)

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, 2018-2020

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Import: 90.750 €

Serveis en Química Computacional.
F. J. Luque, Universitat de Barcelona
310755, 2020
Pharmacelera
Import: 12.000 €

ICREA Acadèmia.
F. Illas, Universitat de Barcelona
2016-2020
Institut Català per a la Recerca Avançada (ICREA, Generalitat de Catalunya)

Synthesis and characterization of the structural modifications of $Y_2WO_6:RE/TiO_2$ 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, North Catholic University, Antofagasta (Xile), P. Alemany, Universitat de Barcelona
Fondecyt, 1181302, 2018-2021
CONICYT

Fortalecimiento del Magister en Química a través de la investigación teórico-experimental en Química de Materiales.
S. Conejeros, North Catholic University, Antofagasta (Xile), P. Alemany, Universitat de Barcelona
Concurso Nacional de Atracción de Capital Humano Avanzado del Extranjero a Chile, 2020-2021
CONICYT

COST Action CA18234 – Computational materials sciences for efficient water splitting with nanocrystals from abundant elements.
M. Caspary Toroker, TECHNION, Haifa, Israel
European Commission, 2019-2023
European Cooperation in Science and Technology Program

Estudi de laboratori i planta pilot per la recuperació d'amoní dels purins.
J. Mata Álvarez, F. Mas, Universitat de Barcelona
Private company contract, 2017-2021
INDUKERN (divisió veterinària)

Efficient CO_2 hydrogenation through transition metals Encapsulated on MFI zeolites.
P. Gamallo, Universitat de Barcelona
QS-2020-1-0028, QS-2020-2-0003, 2020
Red Española de Supercomputación (RES)

CO₂ conversion into light fuels activated by H/H₂ over transition metal encapsulated in MFI zeolites (TM@S-1).

P. Gamallo, Universitat de Barcelona

QS-2020-3-0023, 2020

Red Española de Supercomputación (RES)

Striking chemical orderings in bimetallic nanoparticles with silver and gold atomic shells.

K. Neyman, Universitat de Barcelona

QS-2019-3-0023, **QS-2020-2-0020**, 2019-2020

Red Española de Supercomputación (RES)

Machine-learning adsorption energies on bimetallic surfaces.

K. Neyman, Universitat de Barcelona

QS-2020-3-0015, **QS-2020-1-0017**, 2020-2021

Red Española de Supercomputación (RES)

Cu- and Ni-based bimetallic nanoparticles: global optimization and propagation of exchange-correlation functional error estimates.

Albert Bruix, Universitat de Barcelona

QS-2020-3-003, 2020-2021

Red Española de Supercomputación (RES)

Mechanisms of mutation resistance in hemagglutinin: Is the uncleaved form HA0 the right target?

T. Ginex, F. J. Luque, CSIC, Universitat de Barcelona

2020225437, 2020-2021

Partnership for Advanced computing in Europe (PRACE)

Targeting conformational changes implicated in early events of viral entry.

F. J. Luque, Universitat de Barcelona

COVID-19, 2020

Partnership for Advanced computin in Europe (PRACE)

Identificación de inhibidores de la proteasa Mpro del virus COVID-19 por reposicionamiento de medicamentos.

J. J. Pérez, Universitat Politècnica de Catalunya

COV20/00052, 2020

Instituto de Salud Carlos III (ISCA)

Import: 14.500 €

Identificación de inhibidores de la proteína-S del virus Covid-19 por reposicionamiento de medicamentos.

J. M. Granadino, Universidad de Jaen

CV20-43338, 2020-2021

Junta de Andalucía (JUAN)

Import: 28.583 €

SOL.LICITUD DE PATENT O MARCA _____

Gasoline composition comprising indoline.

J. Delgado Diestre, M. López Reyes, F. J. Luque Garriga (Universitat de Barcelona)

20382663.1-1101



**Institut de Química Teòrica
i Computacional**