

Memòria

2015

Activitats, accions i resultats de la xarxa de referència en química teòrica i computacional

Contingut

1.	PRESENTACIÓ	2
2.	OBJECTIUS DE LA XARXA	4
3.	LÍNIES DE RECERCA.....	4
4.	GRUPS QUE INTEGREN LA XARXA	5
5.	DIRECTORI	6
6.	Resum de les activitats generals de la Xarxa de Referència d'R+D+I en Química Teòrica i Computacional	9
	TRANSFERÈNCIA DE CONEIXEMENT I TECNOLOGIA.....	9
	ACTIVITATS DE 2015.....	10
	a. Accions d'Internacionalització i comercialització	10
	b. Formació.....	15
	c. Màrqueting.....	16
11.	Investigadors DE LA XARXA DE REFERÈNCIA EN R+D+I EN QUÍMICA TEÒRICA I COMPUTACIONAL.....	27
	RESUM DELS INDICADORS.....	31

1. PRESENTACIÓ

Tinc l'honor de presentar la memòria de la Xarxa de Referència d'R+D+I en Química Teòrica i Computacional (XRQTC) corresponent a l'exercici 2015, novè any des del primer contracte programa signat entre el ara Departament d'Empresa i Coneixement i la Fundació Bosch i Gimpera per a la XRQTC.

Aquest any s'ha realitzat una de les activitats més emblemàtiques de la XRQTC, el workshop "New Trends in Computational Chemistry for Industrial Applications", ja a la seva quarta edició, que ha comptat amb una alta participació, tant nacional com internacional, i gràcies a la qual s'han pogut establir noves i profitoses relacions amb diverses empreses dels sectors químic i farmacèutic.

Com cada any, s'ha organitzat la reunió anual de la XRQTC, que serveix d'oportunitat a tots els investigadors que formen part de la xarxa per compartir els resultats i les metodologies de recerca. Aquesta trobada té com a finalitat també permetre als joves investigadors que formen part de la xarxa presentar la recerca que porten endavant.

La recerca portada a terme a la XRQTC ha generat al voltant de 400 publicacions en revistes internacionals amb un alt factor d'impacte, així com de 50 sol·licitud de projectes atorgades i 15 contractes amb empreses. En el conjunt de grups s'ha pogut per tant mesurar un augment en la participació de projectes de concurrència competitiva i de col·laboració amb empreses respecte al any 2014 del, concretament d'un 30% i 7% respectivament. Aquest augment és pot atribuir a la destacada expertesa i reconeixement en ciències computacionals del investigadors que pertanyen a la XRQTC, juntament amb l'ús cada cop més extès del càlcul computacional com a eina per generar previsions fiables i models detallats de la matèria, de les estructures moleculars i reaccions químiques d'una manera ràpida i econòmica, recolzant i complementant així el treball portat a terme de forma experimental.

D'altra banda s'ha detectat una lleugera disminució de la producció científica de la XRQTC respecte a l'any anterior, en gran part deguda a la reducció generalitzada dels recursos que cada grup pot destinar a la recerca, necessària per generar coneixements aplicables a la societat.

Un canvi important que ha viscut la XRQTC aquest any ha sigut la marxa del coordinador informàtic, que ha estat suplert amb la dedicació parcial per part d'un tècnic informàtic que ja prestava servei a un node de càlcul de la XRQTC. Aquesta dedicació ha ajudat a seguir amb la feina de organització tècnica entre els diferents administradors dels grups que formen part de la xarxa.

Finalment ressaltar les activitats realitzades per la promotora, que ha contribuït a l'establiment de llaços amb el sector productiu, a fomentar la participació en programes d'incentivació a l'innovació i a millorar la visibilitat del grups de recerca en química teòrica i computacional, reforçant la assistència

de la XRQTC a clusters i plataformes del sector i incrementant la seva presència a Internet i a les xarxes socials en particular.

Per tot això esperem poder continuar en aquest camí i assolir els objectius marcats pel Contracte Programa 2013-2015 en vigor.

Francesc ILLAS,

director de la XRQTC



2. OBJECTIUS DE LA XARXA

- Realitzar recerca i innovació d'alt nivell en les línies d'investigació que se'ls hagin atribuït, basant-se en la complementarietat dels grups que componen la xarxa de referència d'R+D+I i en l'augment de la massa crítica que la seva col·laboració suposa.
- Aquest objectiu s'ha de concretar en la realització de projectes conjunts sobre línies de recerca i innovació ja endegades o noves.
- Identificar àrees de col·laboració amb els sectors econòmics o productius i establir contractes de recerca i innovació, activitats d'assessorament tècnic o d'altres que dirigeixin la recerca de la xarxa de referència d'R+D+I cap a objectius d'interès comú, assegurant, al mateix temps, una transferència de resultats ràpida i efectiva.
- Intervenir activament en tasques de formació de personal investigador o tècnic altament qualificat, i de formació en tècniques o mètodes d'interès per a les empreses i els organismes públics de recerca.
- Col·laborar amb instituts o grups de recerca estrangers, i participar en xarxes internacionals i en programes d'R+D+I estatals i internacionals.
- Facilitar la mobilitat de personal investigador entre les diferents xarxes de referència d'R+D+I i amb les empreses.
- Optimitzar els recursos de què disposen, particularment d'infraestructures.
- Estimular la transferència dels resultats de la recerca de excel·lència a la societat, sigui mitjançant la estimulació la valorització dels resultats de la recerca, la potenciació dels contractes amb el sector empresarial, la internacionalització, la formació del personal de la XRQTC en àrees d'expertesa que potenciïn els objectius anteriors i la difusió per potenciar la percepció social de la química computacional.

3. LÍNIES DE RECERCA

- Modelatge de la cinètica i la dinàmica de reaccions químiques
- Modelatge de superfícies, sòlids i nanopartícules
- Modelatge de sistemes moleculars amb metalls de transició
- Processos fisicoquímics no lineals en sistemes amb matèria tova (soft matter)
- Modelatge de sistemes biològics a nivell mesoscòpic
- Relacions estructura-activitat quàntiques
- Desenvolupament de noves eines.

4. GRUPS QUE INTEGREN LA XARXA

- Computational Materials Science Laboratory, amb personal de la Universitat de Barcelona
- Grup d'Estructura Electrònica, amb personal de la Universitat de Barcelona
- Grup Dinàmica de Reaccions Químiques, amb personal de la Universitat de Barcelona
- Grup d'Estructura i Xarxes Cel·lulars, amb personal de la Universitat de Barcelona
- Grup de Química Teòrica i Computacional, amb personal de la Universitat de Barcelona i del CSIC
- Grup de Físico-Química de Sistemes Macromolecular d'Interès Ambiental amb personal de la Universitat de Lleida i de la Universitat de Barcelona
- Grup de Bioquímica Integrativa, amb personal de la Universitat de Barcelona
- Grup de Biologia Computacional i Disseny de Fàrmacs amb personal de la Universitat de Barcelona
- Grup de Modelització Molecular i Bioinformàtica de l'Institut de Recerca Biomèdica (IRB) del Parc Científic de Barcelona
- Grup de Bioquímica i Biofísica Computacional de la Universitat de Vic.
- Grup de Dinàmica i Mecanismes de les Reaccions Químiques i Bioquímiques, amb personal de la Universitat Autònoma de Barcelona
- Grup de Síntesi i Modelització de Sistemes amb Metalls de Transició, amb personal de la Universitat Autònoma de Barcelona
- Grup de Síntesi, Estructura i Reactivitat Química, amb personal de la Universitat Autònoma de Barcelona
- Grup de Bioinorgànica Computacional, amb personal de la Universitat Autònoma de Barcelona
- Grup de Química Quàntica, amb personal de la Universitat Rovira i Virgili
- Grup de Química Teòrica i Modelatge i Enginyeria Molecular, amb personal de la Universitat de Girona
- Grup de Química Computacional, amb personal de l'Institut Català d'Investigació Química (ICIQ)
- Laboratori d'Estructura Electrònica de Materials, amb personal de l'Institut de Ciència de Materials de Barcelona i de l'Institut de Nanociències i Nanotecnologia (ICMAB-ICN2-CSIC)
- Grup de Innovació, Modelització i Enginyeria en (Bio)Materials, amb personal de la Universitat Politècnica de Catalunya
- Grup de Simulació Molecular amb personal de l'Institut de Ciència de Materials de Barcelona
- Grup d'Estructura de Materials Moleculars amb personal de la Universitat de Barcelona
- Grup de Disseny i Modelatge de Reaccions Catalitzades per Metalls de Transició amb personal de la Universitat de Girona.
- Grup de simulació quàntica de processos biològics, amb personal de la Universitat de Barcelona



5. DIRECTORI

Nom de la unitat: Laboratori de Ciència dels Materials Computacional
Universitat/Centre: Universitat de Barcelona
Investigador responsable i Director de la Xarxa: Francesc Illas Riera
Telèfon: 93 4021229
e-mail: francesc.illas@ub.edu

Nom de la unitat: Grup d'Estructura Electrònica (GEE)
Universitat/Centre: Universitat de Barcelona
Investigador responsable: Santiago Álvarez
Telèfon: 934021269
e-mail: santiago.alvarez@qi.ub.edu

Nom de la unitat: Grup de Dinàmica de Reaccions Químiques
Universitat/Centre: Universitat de Barcelona
Investigador responsable: Antonio Aguilar Navarro
Telèfon: 93 402 12 24
e-mail: a.aguilar@ub.edu

Nom de la unitat: Grup Estructura i Xarxes Cel·lulars
Universitat/Centre: Universitat de Barcelona
Representant al Consell Científic: Ramon Reigada
Telèfon: 934039290
e-mail: reigada@ub.edu

Nom de la unitat: Grup de Química Teòrica i Computacional
Universitat/Centre: Institut d'investigacions Químiques i Ambientals de Barcelona (CSIC) i Departaments de Química Física i de Química Orgànica de la Universitat de Barcelona
Investigador responsable: Josep Maria Anglada
Telèfon: 934006111
e-mail: anglada@iqac.csic.es

Nom de la unitat: Grup de Físicoquímica de Macromolècules d'Interès Ambiental
Universitat/Centre: Universitat de Lleida (UdL)
Investigador responsable: Jaume Puy Llorens (UdL)
Telèfon: 973 702 529
e-mail: jpuy@quimica.udl.cat

Nom de la unitat: Grup de Bioquímica Integrativa
Universitat/Centre: Universitat de Barcelona
Investigador responsable: Marta Cascante Serratosa
Telèfon: 934021217
e-mail: martacascante@ub.edu

Nom de la unitat: Grup d'Estructura de Materials Moleculars
Universitat/Centre: Universitat de Barcelona

Investigador responsable: Juan J. Novoa Vide
Telèfon: 934021228
e-mail: juan.novoa@ub.edu

Nom de la unitat: Grup de Modelització Molecular i Bioinformàtica
Universitat/Centre: Institut de Recerca Biomèdica (Barcelona)
Investigador responsable: Modesto Orozco
Telèfon: 93 40 37156
e-mail: modesto.orozco@irbbarcelona.org

Nom de la unitat: Grup de Biologia Computacional i Disseny de Fàrmacs
Universitat/Centre: Universitat de Barcelona
Investigador responsable: Javier Luque
Telèfon: 934024557
e-mail: fjluque@ub.edu

Nom de la unitat: Grup de Biologia i Biofísica Computacional
Universitat/Centre: Universitat de Vic
Investigador responsable: Jordi Villà
Telèfon: 93 316 0504
Fax: 93 316 0550
e-mail: jordi.villa@uvic.cat

Nom de la unitat: Grup de Dinàmica i Mecanismes de les Reaccions Químiques i Bioquímiques
Universitat/Centre: Universitat Autònoma de Barcelona
Investigador responsable: Josep M. Lluch López
Telèfon: 93 581 2138
e-mail: lluch@klingson.uab.es

Nom de la unitat: Grup de Síntesi i Modelització de Sistemes amb Metalls de Transició
Universitat/Centre: Universitat Autònoma de Barcelona
Investigador responsable: Agustí Lledós
Telèfon: 935811716
e-mail: agusti@klingson.uab.es

Nom de la unitat: Grup de Síntesi, Estructura i Reactivitat Química
Universitat/Centre: Universitat Autònoma de Barcelona
Investigador responsable: Dr. Vicenç Branchadell Gallo
Telèfon: 935811602
e-mail: rosa.ortuno@uab.cat

Nom de la unitat: Grup d'Estudis Teòrics d'Activació de Biomolècules
Universitat/Centre: Universitat Autònoma de Barcelona
Investigador responsable: Mariona Sodupe
Telèfon: 935813031
e-mail: mariona@klingson.uab.es

Nom de la unitat: Grup de Química Teòrica, Modelatge i Enginyeria Molecular
Universitat/Centre: Universitat de Girona
Investigador responsable: Lluís Blancafort
Telèfon: 972418357
e-mail: lluisb@iqc.udg.es

Nom de la unitat: Grup de Química Quàntica
Universitat/Centre: Universitat Rovira i Virgili
Investigador responsable: Rosa Caballol
Telèfon: 977559570
e-mail: rosa.caballol@urv.cat

Nom de la unitat: Grup de Química Computacional (GQC)
Universitat/Centre: Institut Català d'Investigació Química
Investigador responsable: Feliu Maseras i Cuní
Telèfon: 977 92 02 02
e-mail: fmaseras@icicq.es

Nom de la unitat: Laboratori d'Estructura Electrònica de Materials
Universitat/Centre: Institut de Ciència de Materials de Barcelona (CSIC)
Investigador responsable: Enric Canadell Casanova
Telèfon: 93-5801853 (ext 278)
e-mail: canadell@icmab.es

Nom de la unitat: Grup d'Innovació, Modelització i Enginyeria en (Bio)Materials
Universitat/Centre: Universitat Politècnica de Catalunya
Investigador responsable: Carles Alemán Llansó
Telèfon: 934010883
e-mail: carlos.aleman@upc.edu

Nom de la unitat: Molecular Simulation (MOLSIM)
Universitat/Centre: UB-CSIC
Representant al Consell Científic: Ramon sayos
Telèfon: 93 403 47 60
e-mail: r.sayos@ub.edu

Nom de la unitat: Disseny i Modelatge de Reaccions Catalitzades per Metalls de Transició
Universitat/Centre: Universitat de Girona
Investigador responsable: Miquel Solà
Telèfon: 97 241 89 12
e-mail: miquel@iqc.udg.edu

Nom de la unitat: ESTRUCTURA I FUNCIÓ EN MACROMOLÈCULES
Universitat/Centre: Universitat de Barcelona
Investigador responsable: Carme Rovira
Telèfon: 934039254
e-mail: c.rovira@ub.edu

6. Resum de les activitats generals de la Xarxa de Referència d'R+D+I en Química Teòrica i Computacional

El resum de les activitats de la xarxa XRQTC de l'any 2015 es divideix fonamentalment en dos parts: d'una banda es presenten els resultats de la transferència de coneixement i tecnologia i de l'altra es detallen les activitats de la xarxa en el seu conjunt. Aquestes activitats es divideixen en accions dirigides a la comercialització i internacionalització (incloent organització de workshop i jornades), les de formació i per últim les de marquetig.

Finalment és presentarà un recull de premsa del 2015 amb notícies relacionades amb investigadors de la XRQTC i a continuació un anàlisi i estadística de les principals accions empreses en comunicació digital.

TRANSFERÈNCIA DE CONEIXEMENT I TECNOLOGIA

- Fruit d'una relació establerta al llarg del passats anys amb l'empresa petroquímica i energètica REPSOL al 2014 es va iniciar la realització d'un curs de formació al departament de R+D de sobre aplicació de la química computacional per millorar processos fonamentals com ara catàlisis, mullabilitat de superfícies i estudi de molècules bioactives.
- Amb l'objectiu d'augmentar la promoció i visibilitat dels workshops organitzats per la xarxa i pels seus grups de recerca, s'ha introduït el patrocini privat dels esdeveniments. En particular el workshop "New Trends in computational Chemistry for Industrial Application" ha comptat amb el suport financer de cinc empreses. Tres d'aquestes empreses són catalanes (OMEGA Peripheral, Mind the Byte i HPCNow!) i dos són empreses europees (Scientific Computing and Modelling i Quantum Wise); totes cinc operen en el àmbit de la supercomputació, bé com a proveïdors de equipaments, bé com a proveïdors de serveis o programes.
- S'ha organitzat i concretat una estada per un estudiant de màster computacional, organitzat per grups de la XRQTC, a la seu central de la empresa alemanya BASF (Ludvigshafen). Aquesta estada tindrà lloc al 2016 entre els mesos de Abril i Juny en el departament de recerca i desenvolupament, en particular amb el grup de Química Quàntica, liderat pel Dr. Peter Deglmann, ponent del workshop 2015 de la xarxa. La selecció del estudiant s'ha realitzat entre alguns alumnes de diferents institucions i finalment s'ha escollit un estudiant del Màster en Computació i Catàlisis de l'Institut IQCC de la Universitat de Girona.

A més, s'ha treballat en diferents oportunitats de negoci i propostes de projectes per convocatòries en regim de concurrència competitiva:

- Convocatòria "The UAE Program for Rain Enhancement Science" 2015, en la qual s'ha donat suport per a la formació d'un consorci amb una empresa amb experiència en modelització meteorològica.
- Oportunitat de recerca per un contracte amb una empresa multinacional productora de anticoagulants i altres fàrmacs i productes per a la salut humana i animal, per un estudi d'anàlisi de dades de producció.

- Oportunitat de recerca per un contracte amb una empresa multinacional productora de paper, per començar un projecte de innovació en el àrea de desenvolupament de polímers.
- Oportunitat de recerca per un contracte amb una empresa *startup* de base biotecnològica, per un estudi de re-posicionament de APIs (ingredients farmacològics actius).
- Oportunitat de recerca per un contracte amb una empresa productora de fragàncies per la indústria cosmètica, per un estudi d'estabilitat dels compostos.
- Convocatòria Comunitats RIS3CAT: s'ha impulsat la participació d'un grup a un projecte inclòs en el pla d'actuació de la comunitat RIS3CAT d'energia (IREC), liderat per l'empresa ALSTOM sobre disseny de nous aerogeneradors.
- Estudi de les convocatòries "REDES DE EXCELENCIA" promogut pel Ministeri de Economia i Competitivitat per impulsar diferents grups de la xarxa a presentar una proposta conjunts.

És vol emfatitzar una altra oportunitat de recerca per contracte i/o projecte de col·laboració que s'està treballant juntament amb la xarxa de referència en tecnologia del aliments XaRTA, amb una empresa multinacional que processa i comercialitza soja. La proposta, actualment en fase d'estudi, es basa en la valorització d'algun sub-producte de la empresa i el seu desenvolupament implica necessàriament la col·laboració entre les dos xarxes. S'espera recollir els fruits d'aquesta proposta al 2016.

ACTIVITATS DE 2015

L'activitat de la promotora aquest any 2015 s'ha centrat, en primer lloc, en la detecció de les noves tecnologies que la XRQTC pot oferir, bé al món industrial, bé a altres sectors de la recerca pel tal de trobar sinergies i possibles col·laboracions. En segon lloc ha treballat per ampliar la base de dades d'empreses, participant i organitzant jornades i workshop, promocionant la xarxa en diferents reunions i mitjans de comunicació per tal de donar-li una major visibilitat.

S'ha seguit apostant per la plataforma tecnològica SUSCHEM de química sostenible, la plataforma industrial de fàrmacs innovadors i s'ha començat a formar part del clúster català de materials avançats, MAV. Formar part d'aquestes plataformes, que son estimulants cercles d'institucions i empreses actives en la innovació tecnològica, representen una bona oportunitat per a establir col·laboracions d'interès per a la xarxa.

També s'ha realitzat un apropament a les comunitats RIS3CAT, impulsades pel Govern de la Generalitat i que s'han anat constituint al llarg de l'any. En particular, per afinitat amb als àmbits de coneixement de la XRQTC, s'ha seguit el desenvolupament de les Comunitats de Química, Energia, Alimentació i Salut.

Finalment s'ha organitzat una jornada conjunta amb la xarxa de materials avançats per l'Energia, XARMAE, centrat en un argument d'interès comú a ambdues institucions per tal d'estimular la sinergia entre les xarxes.

a. Accions d'Internacionalització i comercialització

Per tal d'impulsar la contractació i participació a projectes dels grups de la Xarxa, s'han portat a terme les següents activitats promocionals:

- *Assistència a fires, plataformes, cluster i jornades del sector*

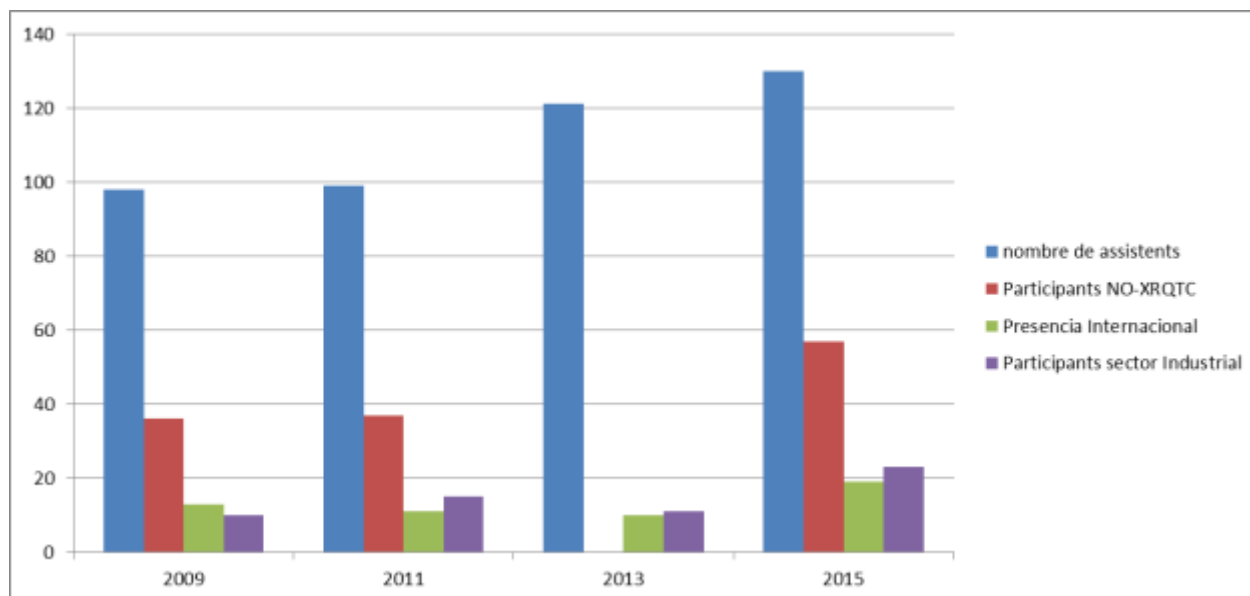
- Seguiments de la Comunitat RIS3CAT de química, organitzada per CTQC i IQS : sessions de treball i de coordinació; comunicació amb el centre coordinador que defineix els àmbits del futur pla d'actuació previst de la comunitat.
- Jornades Suschem "Aportando valor al CO2": trobada per parlar del ús, transformació i emmagatzematge del CO2. Aquestes jornades han permès obtenir una visió general del estat de l'art de les tecnologies d'ús, reducció (i fotoreducció) i conversió del CO2.
- Participació a quatre diferents sessions del Cluster MAV, de materials avançats.
- Assistència a la sessió de treball organitzada per ASCAMM en el marc de la Comunitat RIS3CAT de Fabricació Avançada sobre "TIC's en entorns industrials".
- Reunió de treball de la Comunitat RIS3Cat d'energia: l'entitat organitzadora presenta els grans projectes de la comunitat.
- Varies Jornada CDTi sobre oportunitats de finançament de l'R+D i la innovació empresarial als sectors químic i de salut.
- Participació al congrés Catalunya Emprèn.
- Participació a la reunió de socis Suschem. Presentació dels objectius de innovació en química sostenible i contactes amb empreses europees.
- Assistència al workshop InForm 2015, esdeveniment del sector Pharma.
- Assistència al congrés SLAS 2015 (Barcelona, desembre 2015), organitzat per la plataforma de descobriment de fàrmacs.
- Reunions amb l'entitat BIOCAT, dinamitzadora de la Comunitat RIS3CAT de Salut.

- *Organització i suport de workshops, jornades i congressos*

- Workshop "New Trends in computational Chemistry for Industrial Application, quarta edició. El workshop s'ha celebrat els dies 1 i 2 d'Octubre 2015 a la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona. Es tracta d'una trobada entre investigadors dels mons acadèmic i industrial en el camp de la química teòrica i computacional, amb la finalitat principal de mostrar la recerca d'avantguarda en simulació per ordinador de nous compostos en dos àrees: materials avançats i compostos bioactius amb activitat terapèutica.

Per aconseguir aquesta finalitat, la trobada compta amb experts de cada àrea de reconegut prestigi internacional i té com objectiu fomentar l'intercanvi d'idees i l'establiment de col·laboracions per portar a terme projectes comuns entre els participants

Aquest any el workshop ha rebut la assistència de 130 persones amb un increment de participació tan internacional com industrial en general.



Com ja s'ha comentat anteriorment, el workshop ha comptat amb el suport d'empreses externes. Gràcies als ingressos generades amb aquest patrocini, s'ha pogut introduir al programa de l'esdeveniment la novetat del premi als tres millors pòsters presentats per joves investigadors. La creació dels premis han permès fomentar la participació a la sessió de pòsters, que en aquesta edició ha arribat a tenir 50 sol·licituds.

Els premis (de 300€, 100€ i 50€) han estat atorgats, respectivament, als investigadors:

1. Walther Jürgen, Institute for Research in Biomedicine, Barcelona pel poster intitulat "Towards multiscale investigation of base-pair level properties of chromatin"
2. Lluís Raich, Universitat de Barcelona pel poster intitulat "THE CONFORMATIONAL FREE ENERGY LANDSCAPE OF β -XYLOSE REVEALS A TWO-FOLD CATALYTIC ITINERARY FOR β -XYLANASES"
3. Emanuele Monza, Barcelona Supercomputing Center, pel poster intitulat "Computer Aided Laccases Engineering: new directions"

A sota s'afegeix el programa complet de les jornades.



PROGRAM

Sponsored by





THURSDAY OCTOBER 1st

8:30-9:00	Registration
9:00-9:15	Opening session: Dr. Jordi Alberch, Vice Chancellor, Universitat de Barcelona Dr. Pere L. Cabot, Dean, faculty of Chemistry, universitat de Barcelona Dr. Francisc Illas, Universitat de Barcelona and XROTC Director, Spain
Session 1.	Chairwoman: Dr. Nuria Lopez, Senior Group Leader, ICIQ, Spain
9:15-9:55	Titania in cement and construction industry: the contribution of modeling Dr Gianfranco Pacchioni, Professor, University of Milano Bicocca, Italy.
9:55-10:35	Multiscale modelling of advanced materials with applications in energy storage, military defence and carbon nanoscience Dra. Elena Bichoutskaia, Professor, University of Nottingham, United Kingdom
10:35-11:10	Electron transport in low-dimensional systems for electronic and optoelectronic device simulations Dr. Albert Cirera, Professor, University of Barcelona, Spain
11:15-11:45	Coffee-Break
Session 2.	Chairman: Dr. Daniel Fernández Hevia, INAEL Electrical Systems S.A., Toledo, Spain
11:45-12:25	Modeling-Guided Catalyst Design for Fischer-Tropsch synthesis: Structure, Activity, Selectivity and Stability Dr. Mark Saeys, Professor, University of Ghent.
12:25-13:05	Modeling the industrially relevant heterogeneous Ziegler-Natta catalytic systems Dr. Luigi Cavallo, Professor, King Abdullah University of Science and Technology

13:05-13:45	DFT studies of organic compounds over metal oxide surfaces Dr. Hicham Idriss, Research Fellow, SABIC Saudi Basic Industries Corporation, Saudi Arabia.
13:45-15:15	Lunch networking and Poster Session
Session 3.	Chairwoman: Dra. Mariona Sodupe, Professor, Universitat Autònoma Barcelona, Spain
15:15-15:55	Quantum chemistry meets polymer reaction engineering. Dr. Peter Deglmann, Manager research scientist, BASF SE, Germany.
15:55-16:35	Molecular dynamics explorations of active site structure in designed and evolved enzymes Dra. Silvia Osuna, Research Scientist, IQCC Institute, University of Girona, Spain
16:35-17:00	Coffee-Break
Session 4.	Chairman: Dr. Ramón Crehuet, Scientist, IQAC-CSIC, Spain
17:00-17:40	Biohybrids as novel catalysts: On the role of molecular modeling Dr. Jean Didier Marechal, Lecturer of Physical Chemistry, Universitat Autònoma de Barcelona, Spain
17:40-18:20	Chemical interaction of DNA with complex minerals (hydroxyapatite) Dr. Pau Turon, R&D, Regulatory Affairs and Quality Director, B. Braun Surgical, S.A, Spain.

FRIDAY OCTOBER 2nd

9:00-9:30	Registration
Session 1.	Chairwoman: Dr. Mireia Olivella Garcia, Professor, Vic University, Spain
9:30-10:10	Understanding ligand binding, receptor selectivity and pharmacological profiles on GPCRs from computer simulations Dr. Hugo Gutierrez de Teran, Researcher, Uppsala Universitet, Sweden.
10:10-10:50	Structural and dynamic basis of G protein-coupled receptor activation Dr. Xavier Deupi, Senior Scientist, Paul Scherrer Institute, Switzerland.
10:50-11:20	Coffee-Break
Session 2.	Chairman: Dr. Leonardo Pardo, Professor, Universitat Autònoma Barcelona, Spain
11:20-12:00	Integrating Chemical and Biological Data for Compound Selection and Mode-of-Action Analysis Dr. Andreas Bender, Lecturer, University of Cambridge, United Kingdom.
12:00-12:40	Discovery of non-competitive pharmacological chaperones using structure-based methods Dra. Elena Cubero, Senior Scientist, Minoryx Therapeutics, Barcelona, Spain
12:40-14:00	Cocktail Lunch networking and Poster Session
Session 2.	Chairman: Dr. Gianni De Fabritis, Associate Professor, Universitat Pompeu Fabra, Spain
14:00-14:40	Structural chemogenomics databases to better understand protein-ligand interactions Dr. Iwan de Esch, Full Professor, Medicinal Chemistry, VU University of Amsterdam.

14:40-15:20	Fragment Libraries at Astex and their Application to PPI Targets Dr. Gianni Chessari, Director of Computational Chemistry, Astex Pharmaceuticals, Cambridge, UK.
15:20-15:30	Delivery of Prizes for the Poster Session Contest and Concluding remarks

- S'ha organitzat conjuntament amb la xarxa de referència en materials avançats per l'energia, XARMAE, un workshop centrat en diverses tecnologies per a la conversió de CO₂ en combustibles, que va tindre lloc a Barcelona el 17 de desembre a la seu de l'institut IREC.

La conversió de CO₂ en combustibles o altres productes de valor afegit és un dels mètodes més prometedors per reduir l'emissió de gasos d'efecte hivernacle i controlar l'escalfament global. En aquest workshop es van destacar alguns dels projectes que s'estan desenvolupant a Catalunya tant des del punt de vista experimental com de forma teòrica.

S'adjunta el fulletó de la jornada.



Free Online Inscription

Program

9:00-9:15	Registration
9:15-9:30	Welcome Dr. Raül Benages, XARMAE developer, IREC. Sílvia Chelini, XRQTC, FBIG-UB
9:30-10:00	CO ₂ capture and utilization: where are we today and where are we going? Dr. Lourdes F. Vega, Aixa Technology & Innovation, SL
10:00-10:30	CO ₂ conversion by transition metal carbides based catalyst: Computational modeling and experiments Prof. Dr. Francesc Illas, Dep. de Química Física & IQTCUB, U.B. Barcelona
10:30-11:00	High-pressure catalytic conversion of CO ₂ to chemical energy carriers Dr. Atsushi Urakawa, ICIQ
11:00-11:30	Coffee-networking
11:30-12:00	Materials and Processes for the Thermochemical Production of Solar Fuels Dr. Juan M. Coronado, IMDEA, Madrid
12:00-12:20	CO ₂ valorization to fuels based on a photoelectrochemical process Dr. Teresa Andreu, IREC
12:20-12:40	High Temperature Co-electrolysis of CO ₂ and Water for Chemical Energy Storage Dr. Albert Tarancón, IREC

Per més informació: www.xarmae.org o contacteu amb info@xarmae.org



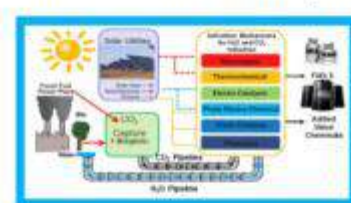
CO₂ Capture & utilization

CO₂ conversion into fuels or other added value products one of the most promising methods to decrease greenhouse gases emission and control the global warming.

Going to a real circular economy in the field of synthetic fuels is a challenge and many technologies are under development trying to solve the problem. In fact, processes are well studied in a lab scale, but problems in up-scaling arise due to plant engineering, durability of materials or elevated cost of implementation and maintenance. These aspects rise to a non-competitive fuel production from precaptured CO₂ in respect to traditional fuels.

In this workshop we underline some projects that are under development in Catalonia from both experimental and theoretical point of view.

You are invited to come and join us!



Venue: IREC, Jardins de les Dones de Negre 1, 2nd floor, Barcelona.

Date: 17th December 2015

b. Formació

Dins de l'apartat de formació s'inclou la Reunió Anual de la xarxa XRQTC, que aquesta any es va celebrar els dies 25 i 26 de juny 2015 i va ser organitzada pel grup de Química Teòrica i Modelatge i Enginyeria Molecular i el grup de Disseny i Modelatge de Reaccions Catalitzades per Metalls de Transició, ambdós de la Universitat de Girona. Aquesta trobada permet als investigadors més joves exposar la seva recerca a més de mantenir informada a tota la xarxa sobre la recerca dels seus grups, s'organitza de manera rotatòria i implica a tota la xarxa.

- *XXXI Reunió anual XRQTC*

Aquest any, la Reunió Anual de la XRQTC s'ha focalitzat en una revisió dels mètodes teòrics i computacionals per l'estudi de processos catalítics, tant en catàlisis homogènia, com heterogènia i enzimàtica.

A més s'ha contat amb la participació de quatre importants investigadors de renom internacional:

7. Dra. Rosa Bulo: Chemistry Department, University of Utrecht
8. Fabien Gatti: Institut Charles Gerhardt, CNRS/Université Montpellier 2
9. Gonzalo Jiménez Osés: Departamento de Química, Universidad de la Rioja
10. Fabrizia Negri: Dipartimento di Chimica 'G. Ciamician', Università di Bologna

Finalment es va aprofitar de la reunió anual per presentar la nova pàgina web de la XRQTC, publicada a finals de 2014 amb un nou disseny gràfic i nous continguts.

c. *Màrqueting*

S'han llençat aquest anys dos campanyes publicitàries a la web, una per promocionar el workshop "New Trends in Computational Chemistry for Industrial Applications" i una per promocionar el workshop "New Advances in Crystal engineering". S'ha utilitzat la pàgina LinkedIn, coneguda eina per ampliar la xarxa de contactes professionals, que permet comunicar-se amb un públic molt ampli però segmentat i possiblement interessat al producte/servei promocionat.

- *Presència de la Xarxa a la premsa*

La Xarxa ha aparegut als següents articles de la premsa, conseqüència fonamentalment dels premis rebuts i dels estudis generats d'interès per la societat:

- La Dra. Núria López, membre de la XRQTC, ha estat distingida amb el premi a l'excel·lència investigadora RSEQ 2015, per les seves destacades contribucions a la Química Teòrica amb èmfasi en el coneixement dels mecanismes de reacció implicats en processos de Catàlisi Heterogènia.
- Tres MEMBRES DE LA XARXA REBEN LA MEDALLA NARCÍS MONTURIOL 2015: Dra. MARTA CASCANTE, Dr. MIQUEL DURAN i Dr. ANTONI OLIVA.
- El diari La VANGUARDIA i el portal SHARP Minds varen realitzar sengles entrevistes al professor Modesto Orozco sobre la simulació in biologia i la seva carrera professional.
- La dra. Laura Masgrau, investigadora i subdirectora de l'Institut de Biotecnologia i de Biomedicina (IBB) de la Universitat Autònoma de Barcelona, i membre de la XRQTC, rep enguany una de les cinc borses d'investigació que es donen a Espanya dins del programa l'Oréal-UNESCO For women in science.
- La dra. Silvia Osuna, concedeix una entrevista al Diari de Girona en ser la investigadora més jove de la Universitat de Girona que ha rebut un ajut europeu, Starting Grant d'1,4 milions, que s'invertiran en una recerca que té per objectiu abaratir el procés de fabricació dels fàrmacs.

- El professor Xavier Gimenez es entrevistat pel diari El País, en relació al seu innovador mètode d'ensenyament i per a la revista Tendencias 21 amb el títol "El clima se resistirá a la manipulación de la geoingeniería", 20 de febrer 2015:
- Varias participacions del professor X. Giménez a programes televisius i notícies: programa "Telenotícies Vespre" de TV3 per parlar d' "El núvol tòxic a Igualada", 13 de febrer 2015; entrevista en el programa "8 al dia" de 8TV amb el títol "Com afecta la salut el clor a les piscines?"; entrevista en el programa "Quequicom" de TV3/C33 amb el títol "Antenas sí, a casa del veí"; entrevista en el programa "El Trencadís" de 8TV amb el títol "Ensenyar ciències amb alt rendiment".

A continuació recopilem les notícies mencionades tal i com varen aparèixer a la premsa.



Premios a la Excelencia Investigadora RSEQ 2015

Dra. Nuria López Alonso (Premio patrocinado por CEPESA)

Por sus destacadas contribuciones en Química Teórica, con énfasis en el conocimiento de los mecanismos de reacción implicados en procesos de Catálisis Heterogénea. Es "Senior Group Leader" en el Instituto Catalán de Investigaciones Químicas (ICIQ). Ha obtenido la prestigiosa ERC Starting Grant (2010-2015).

Durante el último quinquenio ha publicado más de 50 artículos, siendo autora de un total de más de un centenar de artículos, con presencia en revistas de índice de impacto muy elevado en el ámbito multidisciplinar, en la frontera de la química y la física (Journal of the American Chemical Society/Angewandte Chemie/Nature Chemistry/Physical Review Letters). Ha dirigido 5 tesis doctorales. En los últimos cinco años ha impartido más de 15 conferencias en diferentes Instituciones y Centros de Investigación de prestigio, tanto nacionales como en el extranjero. Además del ERC Starting Grant, ha sido IP de 3 proyectos del Plan Nacional, dos de ellos en el último quinquenio. Es activa en el desarrollo de proyectos en colaboración con diferentes y destacadas industrias químicas; hecho significativo atendiendo a la naturaleza de la investigación que desarrolla, centrada en estudios teóricos, a nivel atómico.

URL: http://www.iciq.org/research/research_group/prof-nuria-lopez/



Sílvia Osuna és la investigadora més jove de la UdG

L'empordanesa espera poder formar un equip de 7 persones en una recerca per abaratir la la fabricació de fàrmacs

12.10.2015 | 07:33

GIRONA | DDG Sílvia Osuna Oliveras, del grup de recerca Química Teòrica i Modelatge i Enginyeria Molecular (QTMEM) de l'Institut de Química Computacional i Catàlisi (IQCC) de la UdG, s'ha convertit en la investigadora més jove d'aquesta universitat que ha rebut un ajut europeu Starting Grant, en el seu cas, d'1,4 milions, que s'invertiran en una recerca que té per objectiu abaratir el procés de fabricació dels fàrmacs.

A la UdG hi ha hagut ajuts europeus de més diners, però no a títol individual, com és el cas de Sílvia Osuna, nascuda a Castelló d'Empúries el 1983.

Els ajuts Starting Grant són els més ben dotats, però la dotació depèn de la durada (3 o 5 anys) i de la branca de coneixement, ja que la recerca en el camp tècnic és més cara que en l'àmbit humanístic i social.

Osuna és la quarta investigadora de la UdG que rep aquest ajut. Els quatre que l'han rebut són de l'àmbit de la Química i en tots els casos ha estat per a projectes a 5 anys. El més dotat va ser el de Xavi Ribas, el 2011 (1,489 milions), que supera, per poc, el de la Sílvia Osuna (1,445), i també el Miquel Costas, que el 2009 va ser d'1'299 milions. Però Osuna s'ha convertit en la investigadora més jove que l'obté, amb 32 anys. En Costas en tenia 38 quan el va rebre el 2009, i en Xevi Ribas, 37, el 2011.



Sílvia Osuna. **ddg**

La investigadora catalana que lucha contra el cáncer desde su ordenador

El 63% de los españoles cree que las mujeres no sirven para la investigación de alto nivel. Científicas como Masgrau pretenden demostrar que no es cierto a la vez que buscan nuevos fármacos



24.09.2015 – 05:00 H.

El 63% de los españoles cree que las mujeres **no valen** para la ciencia de alto nivel, según una **encuesta europea** llevada a cabo por l'Oréal. Son sesgos y estereotipos que impiden que las investigadoras alcancen los puestos **más altos** del sistema científico y que incluso les dificultan la **obtención de financiación**. Para cambiar eso, la empresa francesa entrega cada año una beca destinada a apoyar el trabajo de las científicas españolas.

La catalana Laura Masgrau ha sido una de las galardonadas este año en la sede del CSIC de Madrid, donde también se ha celebrado el 15º aniversario del Programa l'Oréal-Unesco *Por las mujeres en la ciencia*. Esta investigadora de la Universidad Autónoma de Barcelona lucha contra el cáncer de colon, pero no desde un laboratorio, como sería de esperar, sino desde un ordenador. Su campo es el de la química computacional y la modelización molecular: "Está todo por explorar, pero esto es precisamente la ciencia", admite emocionada a *Teknautas*.

28-07-2015 15.09

El Govern aprova la concessió de la Medalla i de la Placa Narcís Monturiol a 16 personalitats i 3 institucions

- **Aquests guardons reconeixen el mèrit científic i tecnològic de persones i entitats que han contribuït de manera destacada al desenvolupament de la ciència i la tecnologia a Catalunya**

El Govern ha aprovat avui la concessió de la Medalla i de la Placa Narcís Monturiol a setze personalitats i tres institucions. Aquests guardons, instituïts per la Generalitat l'any 1982, volen distingir les persones i entitats que han contribuït de manera destacada al desenvolupament de la ciència i la tecnologia a Catalunya.

Els guardonats amb la Medalla Narcís Monturiol al mèrit científic i tecnològic són:

Marta Cascante i Serratosa

Catedràtica de Bioquímica i Biologia Molecular a la Universitat de Barcelona (UB). La seva recerca se centra en l'estudi del càncer i les malalties metabòliques. Ha estat pionera en el desenvolupament d'eines per a l'anàlisi del control i la regulació de sistemes bioquímics amb finalitat biomèdica o biotecnològica.

Miquel Duran Portas

Catedràtic de Química Física a la Universitat de Girona (UdG), investigador a l'Institut de Química Computacional i Catàlisi. La seva recerca, fent servir les eines de la química quàntica, se centra en estudis teòrico-computacionals de les propietats elèctriques i òptiques moleculars i les interaccions moleculars febles.

Antoni Oliva Cuyàs

Catedràtic de Química Física a la UAB, on ha estat vicerector de Recerca i de Política Científica, Degà. També ha estat director executiu de l'Institut Català de Nanotecnologia. L'any 2000 va ser nomenat director general de la Comissió Interdepartamental de la Recerca i Innovació Tecnològica (CIRIT). Investigador en el camp de la Química Teòrica.

FORMACIÓN »

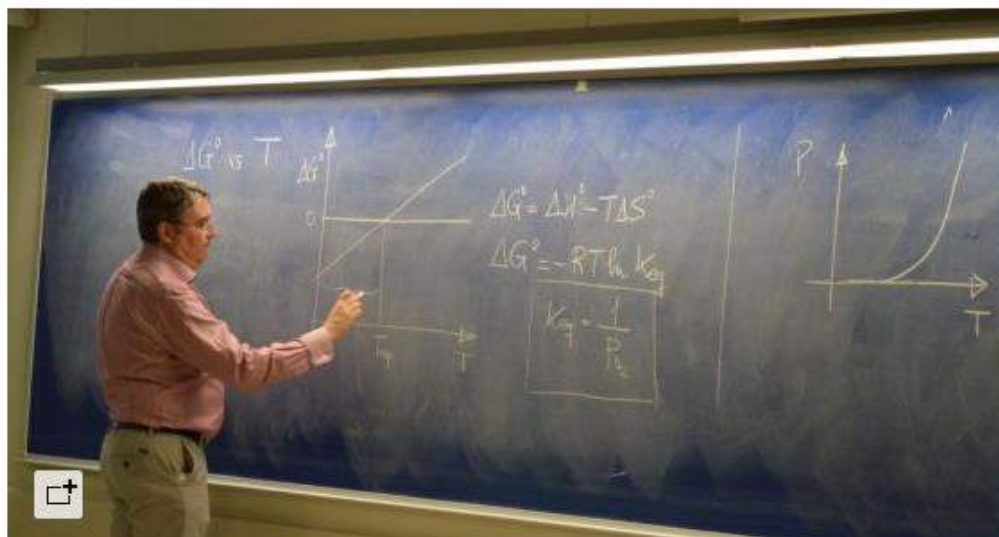
¿Pueden las matemáticas y la física huir de las clases magistrales?

- Un profesor de la Universitat de Barcelona da la vuelta a la metodología de enseñanza. La teoría se aprende en casa
- ["La Universidad es en una fábrica de certificación"](#)
- [Entra en Formación](#)

ANA TORRES MENÁRGUEZ | Madrid | 2 NOV 2015 - 10:36 CET



Archivado en: [Plan Bolonia](#) [EEES](#) [Universidad](#) [Enseñanza pública](#) [Educación superior](#)
[Política educativa](#) [Sistema educativo](#) [Educación](#)



El profesor Xavier Giménez resuelve dudas de los estudiantes.

 Enviar

 Imprimir

 Guardar

Cuando a los profesores de los grados de Ciencias se les plantea dar un giro a su docencia para arrinconar las clases magistrales y poner en práctica otros métodos más estimulantes para los alumnos, suelen dar la misma respuesta: "Los experimentos con gaseosa". Xavier Giménez, profesor titular de Química Física de la [Universitat de Barcelona \(UB\)](#) desde hace 22 años, ha escuchado esas palabras de boca de muchos colegas en repetidas ocasiones. A sus 52 años puede

El clima se resistirá a la manipulación de la geoingeniería

Las medidas más naturales, como reducir las emisiones de CO2, son el camino más corto para evitar el cambio climático, señalan los expertos

En el último informe del IPCC se proponía por vez primera la intervención en el clima terrestre, con técnicas de geoingeniería o de ingeniería climática. Expertos como Ángel M. de Frutos Baraja, catedrático de Física de la Universidad de Valladolid y director del grupo de Óptica Atmosférica, señalan que esta disciplina, sin embargo, está cercana a la ciencia ficción y que, por la complejidad del clima, será difícilmente aplicable. Otros como Xavier Giménez Font, profesor del Departamento de Química Física de la Universidad de Barcelona, opinan en cambio que la ingeniería climática tendrá gran relevancia en el futuro. Por Rosae Martín Peña.

Rosae Martín Peña



Rosae Martín es periodista, investigadora, y redactora de Tendencias 21. [Saber más del autor](#)



Me gusta 214 Tweet

G+ 7

in Share 9

Pin it



Imagen contra el cambio climático. Fuente: flicker.

"Podrían morir peces o seres humanos; nadar en lagos o ríos podría generar enfermedades, podría dejar de salir petróleo de las bombas y las temperaturas promedio podrían incrementarse o disminuirse pero, si no se comunica sobre ello, nada de esto tendrá impacto para la sociedad." Esta cita del sociólogo alemán Luhmann en el año 1986 deja muy claro que aquello que no se comunica, no existe.

Actualmente, los partidos políticos, instituciones, organismos nacionales e internacionales, universidades y la población en general, centran todas sus miras en la crisis económica y financiera, que azota el panorama mundial.

Sin embargo, se está dando un hecho simultáneo: sucesivas catástrofes ambientales y naturales que nos alertan sobre la inminencia y los riesgos de una crisis ambiental y energética sin precedentes, cuyos exponentes más significativos son el [calentamiento global](#) y el [deshielo del Ártico](#), fenómenos que, en su conjunto, configuran el importantísimo problema del [cambio climático](#).

Geoingeniería e ingeniería climática

- Principals accions i estadístiques en comunicació digital

Aquest any s'ha mesurat un augment considerable en visió de pàgina web i les interaccions amb les xarxes socials, ambdós eines essencials per fer conèixer la xarxa XRQTC arreu del món.

WEB

Públic, Visió General

- 6.438 visites.
- 5.688 visitants únics.

- 16.696 pàgines vistes.
- 2,59 pàgines/visita.

Fonts del trànsit, Visió General

- 2.764 visites de trànsit de cerca (Google).
- 1.846 visites de trànsit de referència.
- 1.607 visites de trànsit directe (xrqtc.com).
- 221 visites provinents d'email (Mailchimp).

Social (194 visites del total de visites a web procedeix de les xarxes socials)

- 46% Twitter.
- 38% LinkedIn.
- 15% Facebook.
- 1% Vkontakte i Pocket.

Les principals tasques realitzades a web:

- Comunicació i promoció de la 31^a reunió anual de la XRQTC, el 4rt New Trends i el 2nd Advances in Crystal Engineering.
- S'han penjat les següents notícies:
 - o The XXXI Annual XRQTC Meeting will take place in Girona.
 - o La Dra. Núria Lopez, premi a l'excel·lència investigadora RSEQ 2015.
 - o XRQTC Workshop 2015: Thanks to our sponsors!!.
 - o Tres membres de la Xarxa reben la Medalla Narcís Monturiol 2015: Marta Cascante, Miquel Duran y Antoni Oliva.
 - o Silvia Osuna has received the prestigious Starting Grant of the European Research Council.
 - o El programa For Women in Science premia a Laura Masgrau, membre de la XRQTC.
 - o A message of thanks to participants in the New Trends in Computational Chemistry for Industrial Applications.
 - o The Computational Materials Science Laboratory participate to the NoMad.
 - o CO2 Capture & utilization.
 - o A new edition of the workshop "New Advances in Crystal Engineering".

Aquest 2015 s'ha renovat tot el web passant del gestor de continguts (CMS) Joomla actual a un WordPress. Aquest CMS és més àgil a l'hora de publicar i gestionar el backoffice, més pensat per un usuari sense coneixements de programació.

S'han enviat **21 newsletters**, amb un **43% d'obertura de correu de mitjana** i un **13% de mitjana de clics en els enllaços que incorpora el butlletí**.

Les estadístiques que ens ofereix MailChimp (a cost zero) ens permet quins investigadors estan més interessats en segons quins apartats del newsletter, i això ens dona una informació molt vàlida alhora de redefinir l'estratègia de comunicació i adaptar-la millor a cada especialitat.

SLIDESHARE

Actualment hi ha **38 documents** penjats i oberts a la comunitat, sobre els **35 slideshares** de l'any passat **(+8,6%)**. S'ha produït **1 descàrrega**.

En total hi ha hagut **4.327 visualitzacions** amb una mitjana de **360 visualitzacions per mes**.

Els **3 documents** penjats l'any 2015 són els següents:

	Document	Núm. visualitzacions
1	Program web New Trends 2015	46
2	Poster session abs new trends 2015	63
3	Tècnic infomàtic XRQTC	1023

En aquest canal s'hi poden trobar presentacions, programes de jornades, articles dels investigadors de la xarxa, calls, ofertes de treball...

TWITTER

267 seguidors a 1 de gener de 2015 i **386 seguidors** a 31 de desembre de 2015 **(+45%)**. **963 tuits** a 31 de desembre de 2014, i a 31 de desembre de 2015, **1265 tuits (+31%)**.

30 llistes en les que estem presents **(16 de l'any passat)**. A les llistes t'hi afegeixen els teus seguidors, per tant no és una acció directe nostra, sinó que si ets inclòs en una llista és perquè els teus seguidors creuen interessant el teu perfil i l'inclouen:

	Nom de la llista	Núm. de membres
1	Chemistry	5000
2	Developers	5000
3	Big Data discussions	5000



4	PhD4	5000
5	Sciencejobs	4988
6	Saaslist-v1	4974
7	BigData	4970
8	Univ. De Vic	4415
9	Bioinformàtics	3386
10	Economie circulaire	3266
11	BigData	2065
12	Computing for Research	1866
13	People who tweet about Yo	548
14	Pending 2	465
15	CatRDI	457
16	RDI	345
17	Investigadors	285
18	Science	181
19	Catalunya	98
20	recerca_cat	96
21	UDG	94
22	Cultura Científica	84
23	H2020	52
24	Sistema innovació català	35
25	Research	28

26	MolecularModeling	18
27	HPC	15
28	Institutional	10
29	Chemistry	8
30	Centros investigación ES	8

S'ha de destacar que a Twitter són tan importants els **followers** com els **followings** atès que entre tots es crea una comunitat que es retroalimenta d'informació que en un moment o altre ens pot beneficiar; llegeixi's: convocatòries, borsa de treball, oportunitats de negoci, bibliografia, detecció de prescriptors, dinamitzadors, etc...

LINKEDIN

88 seguidors en el *company profile* de la XRQTC, respecte els **46** de l'any passat, un creixement d'un **91%** de la comunitat. Es pengem en el *company profile* de la XRQTC s'han publicat **44 actualitzacions** referents a borsa de treball, *workshops* propis i d'elevat interès per la nostra comunitat (investigadors interns i també pel visitant extern amb alt grau d'especialització) i notícies del web de la XRQTC.

YOUTUBE

Per la Reunió Anual del 2013 es va obrir un compte a YouTube amb l'objectiu de difondre el vídeo promocional. Aquest vídeo té una producció professional i se'n va fer una promoció destacada a web i xarxes socials.

El 2014 teníem 6 subscriptors i s'havia reproduït 167 vegades i aquest **2015 el nombre de subscriptors és de 5 i s'ha reproduït 198 vegades**. És un canal que s'hauria de tenir en compte pel proper any atès que els documents audiovisuals muntats com a píndoles d'aproximadament 1 minut tenen un component viral (de compartició) i de consum molt elevat a la xarxa.

11. Investigadors DE LA XARXA DE REFERÈNCIA EN R+D+I EN QUÍMICA TEÒRICA I COMPUTACIONAL

Investigadors de la Xarxa a 31 de desembre de 2015

	Doctors *	Predocctorals	total
Laboratori de Ciència dels Materials Computacional	14	10	24
Grup d'Estructura Electrònica	7	4	11
Grup de Dinàmica de Reaccions Químiques	6	1	7
Grup de Estructures i Xarxes Cel·lulars	1	0	1
Grup de Química Teòrica i Computacional	5	1	6
Biologia Computacional i Disseny de Fàrmacs	9	13	22
Grup de Físico-Química de Sistemes Macromolecular d'Interès Ambiental	10	5	15
Grup de Bioquímica Integrativa	11	3	14
Grup d'Estructura de Materials Moleculars	4	3	7
Grup de Modelització Molecular i Bioinformàtica	13	9	22
Grup de Bioquímica i Biofísica Computacional	3	1	4
Grup de Dinàmica i Mecanismes de les Reaccions Químiques i Bioquímiques	6	3	9
Grup de Síntesi i Modelització de Sistemes amb Metalls de Transició	3	4	7
Grup de Síntesi, Estructura i Reactivitat Química	4	1	5
Estudis Teòrics d'Activació de Biomolècules	6	5	11
Grup de Química Quàntica	11	13	23
Grup de Química Computacional	13	12	25
Laboratori d'Estructura Electrònica de Materials	12	5	17
Grup d'Innovació, Modelització i Enginyeria en (Bio)Materials	12	7	19
Química Teòrica, Modelatge i Enginyeria Molecular	10	3	13
Grup de Disseny i Modelatge de Reaccions Catalitzades per Metalls de Transició	5	6	11
Molecular Simulation Group (MOLSIM)	3	3	6
Simulació quàntica de processos	2	2	4
Total	170	114	283

**Doctors*

Catedràtic funcionari	23
Professor titular	12
Agregat	16
Contractat centre recerca	3
ICREA	6
Ramon y Cajal	4
Investigador Contractat	2
Becari Postdoctoral	21
Juan de la Cierva	
Professor Investigació (CSIC)	3
Investigador Científic (CSIC)	3
Científic Titular (CSIC)	4
Lector	1
Professor Emèrit	1
Professor Associat	6
Beatriu de Pinòs	2
Contractat empresa	
Tècnic suport a la recerca	1
ERC Starting Grant	2
Marie Curie	4
Titular interí	
Professor Serra Hunter	2
Investigador distingit	2
Cofund	1

Alta investigadors durant 2014

	Doctors	Predocctorals	Total
Laboratori de Ciència dels Materials Computacional	2	3	5
Grup d'Estructura Electrònica	1		1
Grup de Dinàmica de Reaccions Químiques	0	0	0
Grup de Estructures i Xarxes Cel·lulars		0	
Grup de Química Teòrica i Computacional	0	1	1
Biologia Computacional i Disseny de Fàrmacs	2	4	6
Grup de Físico-Química de Sistemes Macromolecular d'Interès Ambiental	0	0	0
Grup de Bioquímica Integrativa		2	2
Grup d'Estructura de Materials Moleculars		3	3
Grup de Modelització Molecular i Bioinformàtica	2	0	0
Grup de Bioquímica i Biofísica Computacional	0	0	
Grup de Dinàmica i Mecanismes de les Reaccions Químiques i Bioquímiques	0	0	0
Grup de Síntesi i Modelització de Sistemes amb Metalls de Transició			0
Grup de Síntesi, Estructura i Reactivitat Química	1	2	3
Estudis Teòrics d'Activació de Biomolècules		2	2
Grup de Química Quàntica	2	5	7
Grup de Química Computacional	4	1	5
Laboratori d'Estructura Electrònica de Materials	0	0	0
Grup d'Innovació, Modelització i Enginyeria en (Bio)Materials			
Química Teòrica, Modelatge i Enginyeria Molecular	0	0	0
Grup de Disseny i Modelatge de Reaccions Catalitzades per Metalls de Transició	0	1	1
Molecular Simulation Group (MOLSIM)		3	3
Simulació quàntica de processos	0	0	0
Total	15	33	48



Baixa investigadors durant 2014

	Doctors *	Predocctorals	Total
Laboratori de Ciència dels Materials Computacional	2	3	5
Grup d'Estructura Electrònica	1	1	2
Grup de Dinàmica de Reaccions Químiques	1	1	2
Grup de Estructures i Xarxes Cel·lulars		1	1
Grup de Química Teòrica i Computacional	0	0	0
Biologia Computacional i Disseny de Fàrmacs	-	2	2
Grup de Físico-Química de Sistemes Macromolecular d'Interès Ambiental	1	1	1
Grup de Bioquímica Integrativa	1	7	8
Grup d'Estructura de Materials Moleculars		1	1
Grup de Modelització Molecular i Bioinformàtica	3	0	3
Grup de Bioquímica i Biofísica Computacional	0	0	0
Grup de Dinàmica i Mecanismes de les Reaccions Químiques i Bioquímiques	0	2	2
Grup de Síntesi i Modelització de Sistemes amb Metalls de Transició	0	0	0
Grup de Síntesi, Estructura i Reactivitat Química	3	0	0
Estudis Teòrics d'Activació de Biomolècules		2	2
Grup de Química Quàntica	2	3	4
Grup de Química Computacional	2	2	4
Laboratori d'Estructura Electrònica de Materials	0	0	0
Grup d'Innovació, Modelització i Enginyeria en (Bio)Materials			
Química Teòrica, Modelatge i Enginyeria Molecular	3	0	3
Grup de Disseny i Modelatge de Reaccions Catalitzades per Metalls de Transició	1	0	1
Molecular Simulation Group (MOLSIM)			0
Simulació quàntica de processos	0	1	1
Total	16	19	35

RESUM DELS INDICADORS

DE SEGUIMENT RELATIUS AL CONTRACTE PROGRAMA DE LA XARXA DE REFERÈNCIA D'R+D+I EN QUÍMICA TEÒRICA I COMPUTACIONAL PER L'ANY 2014

	Grups individual	Grups conjuntament	Total
Articles científics publicats en revistes internacionals	351	40	391
Sol·licituds presentades a convocatòries públiques	52	0	52
Sol·licituds atorgades en convocatòries públiques	55	4	59
Tesis doctorals llegides, dirigides per membres de la xarxa	28	0	28
Tesis doctorals en curs, dirigides per membres de la xarxa	87	4	91
Congressos, cursos i altres activitats de formació organitzats	18	8	26
Ponències presentades a congressos	237	30	267
Activitats de divulgació científica	23	0	23
Patents presentades	2	0	2
Patents obtingudes	4	0	4
Convenis o contractes vigents amb empreses o amb altres entitats	15		15