



## Ramon Crehuet Simon

Generado desde: Editor CVN de FECYT

Fecha del documento: 29/03/2019

**v 1.4.0**

ecf680c311c8657658c5ac14b7fb3286

Este fichero electrónico (PDF) contiene incrustada la tecnología CVN (CVN-XML). La tecnología CVN de este fichero permite exportar e importar los datos curriculares desde y hacia cualquier base de datos compatible. Listado de Bases de Datos adaptadas disponible en <http://cvn.fecyt.es/>

## Resumen libre del currículum

Descripción breve de la trayectoria científica, los principales logros científico-técnicos obtenidos, los intereses y objetivos científico-técnicos a medio/largo plazo de la línea de investigación. Incluye también otros aspectos o peculiaridades importantes.

Soy Científico Titular del CSIC desde 2004. Estoy adscrito al Instituto de Química Avanzada de Cataluña, en Barcelona. Tengo una licenciatura en Química y un máster y un doctorado en Química Física. He publicado más de 50 artículos en revistas revisadas por pares y varios capítulos de libro. Mi índice h es 21 en Google Scholar y 19 en Scopus.

He dirigido 4 tesis doctorales y 5 másteres. Para mí es muy importante la formación y educación de nuevos investigadores. Por ello, he participado como profesor de dos másteres de modelización y de química computacional. También imparto el curso “Python para científicos”, tanto como curso de post-grado, como curso de formación interna del CSIC y como curso del instituto Severo-Ochoa ICIQ. Mi laboratorio también acoge regularmente estudiantes de grado y de máster de distintas facultades, como Química, Bioquímica, y Biotecnología.

He sido Investigador Principal en varios proyectos. Empezando con una Marie Curie European Reintegration Grant hasta varios proyectos de Plan Nacional. También he obtenidos varios proyectos competitivos de recursos computacionales en la Red Española de Supercomputación.

Tengo una amplia experiencia en el desarrollo y la aplicación de métodos teóricos y computacionales. Durante la etapa predoctoral, estudié reacciones de química atmosférica, y a partir del post-doc, me centré en el estudio de biomoléculas y, en particular, la catálisis enzimática y la dinámica de proteínas. He trabajado en varios aspectos de la relación entre la dinámica de las proteínas y su función, evaluando los efectos de la flexibilidad a distintas escalas.

Más recientemente he ampliado mi investigación a las Proteínas Intrínsecamente Desordenadas y su papel en la separación líquido-líquido. Estas proteínas juegan papeles esenciales en cáncer y enfermedades neurodegenerativas. Sin embargo, no son fáciles de estudiar y la mejor forma de obtener modelos estructurales es integrando datos de RMN, SAXS y dinámica molecular. Métodos que permitan esta integración son también el foco de mi trabajo.

Mi investigación se ubica en la intersección entre la química, la biología estructural y la biofísica. Requiere un enfoque multidisciplinario que siempre he tratado de conseguir mediante colaboraciones con expertos en distintos campos.

Por último quiero destacar mi esfuerzo en comunicar la ciencia, tanto participando en charlas de divulgación, como meetups, o como las organizadas por el CSIC. Soy también activo en foros científicos como stack-overflow y uso los medios sociales con finalidades científicas. Mi perfil de twitter es @rcrehuet.

Para más detalles pueden visitar: <http://iqac.csic.es/qt>



## Indicadores generales de calidad de la producción científica

Descripción breve de los principales indicadores de calidad de la producción científica (sexenios de investigación, tesis doctorales dirigidas, citas totales, publicaciones en primer cuartil (Q1), índice h...). Incluye también otros aspectos o peculiaridades importantes.

Sexenios: 3 (último concedido 17/06/2015)  
Número de tesis doctorales dirigidas: 3 (completadas), 1(en proceso)  
Número de citas: 979 (WOS) y 1034 (Scopus)  
Número de citas sin auto-citas (WOS): 975  
h-index: 19 (Scopus y WOS), 21 (Google Scholar)  
54 artículos científicos (53 en revistas internacionales peer-reviewed)  
2 capítulos en libros  
1 libro de divulgación científica



## Ramon Crehuet Simon

Apellidos: **Crehuet Simon**  
 Nombre: **Ramon**  
 ORCID: **0000-0002-6687-382X**  
 ScopusID: **6602573391**  
 ResearcherID: **G-4140-2011**  
 Página web personal: **<http://www.iqac.csic.es/qtc>**

### Situación profesional actual

**Entidad empleadora:** Consejo Superior de Investigaciones Científicas      **Tipo de entidad:** Agencia Estatal  
**Departamento:** Dept. de Química Biológica y Modelización Molecular, INSTITUTO DE QUIMICA AVANZADA DE CATALUÑA  
**Categoría profesional:** Científico Titular  
**Fecha de inicio:** 14/09/2009  
**Modalidad de contrato:** Funcionario/a      **Régimen de dedicación:** Tiempo completo  
**Primaria (Cód. Unesco):** 230700 - Química física  
**Secundaria (Cód. Unesco):** 230226 - Bioquímica física  
**Terciaria (Cód. Unesco):** 240600 - Biofísica  
**Identificar palabras clave:** Química computacional; Química biofísica

### Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
	INSTITUTO DE QUIMICA AVANZADA DE CATALUÑA	Contratado Ramon y Cajal	01/02/2004

**Entidad empleadora:** INSTITUTO DE QUIMICA AVANZADA DE CATALUÑA  
**Categoría profesional:** Contratado Ramon y Cajal  
**Fecha de inicio:** 01/02/2004      **Duración:** 5 años



## Formación académica recibida

### Titulación universitaria

Estudios de 1º y 2º ciclo, y antiguos ciclos (Licenciados, Diplomados, Ingenieros Superiores, Ingenieros Técnicos, Arquitectos)

**Titulación universitaria:** Titulado Superior

**Nombre del título:** Licenciado en Química

**Entidad de titulación:** Universitat de Barcelona

**Fecha de titulación:** 27/09/1996

**Tipo de entidad:** Universidad

### Doctorados

**Programa de doctorado:** doctor en Química

**Entidad de titulación:** Universitat de Barcelona

**Fecha de titulación:** 29/01/2001

**Tipo de entidad:** Universidad

### Conocimiento de idiomas

Idioma	Comprensión auditiva	Comprensión de lectura	Interacción oral	Expresión oral	Expresión escrita
Alemán	A1	A2	A2	A2	A2
Francés	C1	C1	C1	C1	B2
Inglés	C1	C1	C1	C1	C1
Catalán	C2	C2	C2	C2	C2
Español	C2	C2	C2	C2	C2

## Actividad docente

### Formación académica impartida

**1 Nombre de la asignatura/curso:** Introducción al Python para Científicos

**Titulación universitaria:** Curso de formación

**Fecha de inicio:** 04/06/2018

**Fecha de finalización:** 2018

**Nº de horas/créditos ECTS:** 30

**Entidad de realización:** Institut Català d'Investigació Química

**Ciudad entidad realización:** Tarragona,

**Fecha de finalización:** 08/06/2018

**Tipo de horas/créditos ECTS:** Horas

**Tipo de entidad:** Centro de I+D



- 2** **Nombre de la asignatura/curso:** Introducción al Python para Científicos  
**Titulación universitaria:** Curso de Formación  
**Fecha de inicio:** 19/03/2018 **Fecha de finalización:** 23/03/2018  
**Fecha de finalización:** 2018 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Horas  
**Nº de horas/créditos ECTS:** 30  
**Entidad de realización:** Consejo Superior de Investigaciones Científicas **Tipo de entidad:** Agencia Estatal  
**Ciudad entidad realización:** Barcelona,
- 3** **Tipo de docencia:** Docencia oficial  
**Nombre de la asignatura/curso:** Herramientas computacionales  
**Tipo de programa:** Máster oficial **Tipo de docencia:** Teórica presencial  
**Tipo de asignatura:** Troncal  
**Titulación universitaria:** Máster de modelización computacional atomística y multiescala en física, química y bioquímica  
**Fecha de inicio:** 09/2015 **Fecha de finalización:** 01/2018  
**Fecha de finalización:** 2018 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos  
**Nº de horas/créditos ECTS:** 3  
**Entidad de realización:** Universitat de Barcelona **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Barcelona, Cataluña, España
- 4** **Nombre de la asignatura/curso:** Python para Científicos  
**Titulación universitaria:** Curso de Extensión Universitaria  
**Fecha de inicio:** 12/06/2017 **Fecha de finalización:** 16/06/2017  
**Fecha de finalización:** 2017 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Horas  
**Nº de horas/créditos ECTS:** 30  
**Entidad de realización:** Universitat de Barcelona **Tipo de entidad:** Universidad  
**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Química  
**Ciudad entidad realización:** Barcelona, Cataluña, España
- 5** **Nombre de la asignatura/curso:** Introducción al Python para Científicos, 2a ed  
**Titulación universitaria:** Curso de Formación  
**Fecha de inicio:** 14/03/2016 **Fecha de finalización:** 10/06/2016  
**Fecha de finalización:** 2016 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Horas  
**Nº de horas/créditos ECTS:** 30  
**Entidad de realización:** Consejo Superior de Investigaciones Científicas **Tipo de entidad:** Agencia Estatal  
**Ciudad entidad realización:** Barcelona,
- 6** **Nombre de la asignatura/curso:** Introducción al Python para Científicos, 1a ed  
**Titulación universitaria:** Curso de Formación  
**Fecha de inicio:** 14/03/2016 **Fecha de finalización:** 18/03/2016  
**Fecha de finalización:** 2016 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Horas  
**Nº de horas/créditos ECTS:** 30  
**Entidad de realización:** Consejo Superior de Investigaciones Científicas **Tipo de entidad:** Agencia Estatal  
**Ciudad entidad realización:** Barcelona,
- 7** **Nombre de la asignatura/curso:** Python para Científicos  
**Titulación universitaria:** Curso de Extensión Universitaria  
**Fecha de inicio:** 11/05/2015 **Fecha de finalización:** 26/06/2015



**Fecha de finalización:** 2015

**Entidad de realización:** Universitat de Barcelona

**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Química

**Tipo de entidad:** Universidad

**8 Nombre de la asignatura/curso:** Introducció al Python per a científics

**Titulació universitària:** Curs ICE

**Fecha de inicio:** 03/02/2014

**Fecha de finalización:** 07/02/2014

**Fecha de finalización:** 2014

**Entidad de realización:** Universitat de Barcelona

**Tipo de entidad:** Universidad

**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Química

**9 Tipo de docencia:** Docencia oficial

**Nombre de la asignatura/curso:** Tècniques Computacionals

**Tipo de programa:** Máster oficial

**Titulació universitària:** Master Universitario Oficial en Química Teórica y Computacional

**Frecuencia de la actividad:** 2

**Fecha de finalización:** 2012

**Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos

**Nº de horas/créditos ECTS:** 40

**Entidad de realización:** Universitat de Barcelona

**Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad realización:** Cataluña, España

## Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

**1 Título del trabajo:** Treball de Fi de Màster

**Entidad de realización:** Universitat de Girona

**Tipo de entidad:** Universidad

**Alumno/a:** Ferran Planas Padrós

**Fecha de defensa:** 08/07/2016

**2 Título del trabajo:** Treball de Fi de Grau

**Entidad de realización:** Universitat de Barcelona

**Tipo de entidad:** Universidad

**Alumno/a:** Ferran Planas Padrós

**Fecha de defensa:** 01/07/2015

**3 Título del trabajo:** Doctor en Química

**Entidad de realización:** Universitat de Barcelona

**Tipo de entidad:** Universidad

**Alumno/a:** Melchor Sánchez Martínez

**Fecha de defensa:** 09/12/2014

**4 Título del trabajo:** Treball de Fi de Grau

**Entidad de realización:** Universitat de Barcelona

**Tipo de entidad:** Universidad

**Alumno/a:** Jelisa Iglesias

**Fecha de defensa:** 2013

**5 Título del trabajo:** Doctor en Química

**Entidad de realización:** Universitat de Barcelona

**Tipo de entidad:** Universidad

**Alumno/a:** Enrique Marcos Benteo

**Fecha de defensa:** 16/01/2012





- 6 Título del trabajo:** Master Universitario Oficial  
**Entidad de realización:** Universitat de Barcelona **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Melchor Sánchez Martínez  
**Fecha de defensa:** 09/09/2011
- 7 Título del trabajo:** Doctor en Química  
**Entidad de realización:** Universitat de Barcelona **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Aurora Jiménez Rodríguez  
**Fecha de defensa:** 26/03/2010
- 8 Título del trabajo:** DEA  
**Entidad de realización:** Universitat de Barcelona **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Enrique Marcos Benteo  
**Fecha de defensa:** 17/06/2008
- 9 Título del trabajo:** DEA  
**Entidad de realización:** Universitat de Barcelona **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Aurora Jiménez Rodríguez  
**Fecha de defensa:** 15/06/2007
- 10 Título del trabajo:** PFC  
**Entidad de realización:** Universitat Ramon Llull **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Enrique Marcos Benteo  
**Fecha de defensa:** 10/01/2007

## Experiencia científica y tecnológica

### Actividad científica o tecnológica

#### Proyectos de I+D+i financiados en convocatorias competitivas de Administraciones o entidades públicas y privadas

- 1 Nombre del proyecto:** Proteínas intrínsecamente desordenadas: cerrando la brecha entre simulaciones y experimentos (CTQ2016-78636-P)  
**Entidad de realización:** INSTITUTO DE QUIMICA AVANZADA DE CATALUÑA **Tipo de entidad:** Agencia Estatal  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Ramon Crehuet Simon  
**Nº de investigadores/as:** 3  
**Entidad/es financiadora/s:** Ministerio de Economía y Competitividad  
**Fecha de inicio-fin:** 30/12/2016 - 29/12/2020  
**Cuantía total:** 36.300 €
- 2 Nombre del proyecto:** Integración de datos de SAXS en simulaciones biomoleculares mediante técnicas de Machine Learning  
**Modalidad de proyecto:** De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).  
**Entidad de realización:** Universidad de Copenhague





**Tipo de entidad:** Centros y Estructuras  
Universitarios y Asimilados

**Ciudad entidad realización:** Copenhague, Dinamarca

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Ramon Crehuet Simon

**Nº de investigadores/as:** 1

**Entidad/es financiadora/s:**

Ministerio de Educación Cultura y Deporte

**Ciudad entidad financiadora:** España

**Nombre del programa:** Salvador de Madariaga

**Fecha de inicio-fin:** 01/08/2018 - 30/01/2019

**Duración:** 6 meses

**Cuantía total:** 17.850 €

**Régimen de dedicación:** Tiempo completo

**3 Nombre del proyecto:** Disorder effects on large domain dynamics of the scavenger decapping enzyme  
View Application

**Entidad de realización:** Barcelona Supercomputing Centre **Tipo de entidad:** Centro de I+D  
Centre

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Ramon Crehuet Simon

**Nº de investigadores/as:** 4

**Entidad/es financiadora/s:**

Red Española de Supercomputación

**Tipo de entidad:** Organismo Público de  
Investigación

**Fecha de inicio-fin:** 01/07/2017 - 31/10/2017

**4 Nombre del proyecto:** PCNA sliding mechanism on DNA

**Entidad de realización:** Barcelona Supercomputing Centre **Tipo de entidad:** Centro de I+D  
Centre

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Ramon Crehuet Simon

**Nº de investigadores/as:** 2

**Entidad/es financiadora/s:**

Red Española de Supercomputación

**Tipo de entidad:** Organismo Público de  
Investigación

**Fecha de inicio-fin:** 01/07/2017 - 31/10/2017

**5 Nombre del proyecto:** PCNA sliding mechanism on DNA

**Entidad de realización:** Barcelona Supercomputing Centre **Tipo de entidad:** Centro de I+D  
Centre

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Ramon Crehuet Simon

**Nº de investigadores/as:** 4

**Entidad/es financiadora/s:**

Red Española de Supercomputación

**Tipo de entidad:** Organismo Público de  
Investigación

**Fecha de inicio-fin:** 01/07/2016 - 31/10/2016

**6 Nombre del proyecto:** Descripción de proteínas intrínsecamente desordenadas mediante la integración de  
datos de RMN y SAXS a simulaciones Coarse Grained (CTQ2012-33324)

**Entidad de realización:** INSTITUTO DE QUIMICA AVANZADA DE CATALUÑA **Tipo de entidad:** Agencia Estatal

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Ramon Crehuet Simon

**Nº de investigadores/as:** 3



**Entidad/es financiadora/s:**

Ministerio de Economía y Competitividad

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2013 - 31/12/2015

**Cuantía total:** 24.570 €

- 7 Nombre del proyecto:** Acoplamiento entre Dinámica y Catálisis en los enzimas. Desarrollo de métodos y estudio de la familia de la kinasa de NAG y de las aldolasas de clase II (CTQ2009-08223)

**Entidad de realización:** INSTITUTO DE QUIMICA **Tipo de entidad:** Agencia Estatal AVANZADA DE CATALUÑA

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Ramon Crehuet

**Nº de investigadores/as:** 3

**Entidad/es financiadora/s:**

Ministerio de Ciencia e Innovación. Investigación **Tipo de entidad:** ministerio

**Ciudad entidad financiadora:** Madrid, Comunidad de Madrid, España

**Fecha de inicio:** 01/01/2010

**Duración:** 3 años

**Cuantía total:** 41.140 €

- 8 Nombre del proyecto:** Métodos computacionales para el estudio del acoplamiento entre la catálisis y la dinámica en los enzimas (200980I058)

**Entidad de realización:** INSTITUTO DE QUIMICA **Tipo de entidad:** Agencia Estatal AVANZADA DE CATALUÑA

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Ramon Crehuet Simon

**Nº de investigadores/as:** 3

**Entidad/es financiadora/s:**

CSIC

**Fecha de inicio:** 01/01/2010

**Duración:** 2 años

**Cuantía total:** 30.000 €

- 9 Nombre del proyecto:** Ajuts Suport a Grup de recerca consolidats: Química teòrica i computacional. (2009SGR1472)

**Entidad de realización:** Dept. de Química Física y Dep. de Química Orgànica de la Universitat de Barcelona e Instituto de Química Avanzada de Catalunya (CSIC).

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** rincipal: Santiago Olivella Nello.

**Nº de investigadores/as:** 9

**Entidad/es financiadora/s:**

Departament d'Universitats Recerca i Societat de la Informació (DURSI) Generalitat de Catalunya.

**Fecha de inicio:** 01/01/2009

**Duración:** 5 años

**Cuantía total:** 43.680 €

- 10 Nombre del proyecto:** Photochemistry and Supramolecular Chemistry. Computational and experimental approaches to elucidate the nature of aurophilic interactions. (HP2008-0086)

**Entidad de realización:** CSIC y Universidade Nova de Lisboa

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Ramon Crehuet Simon (parte española) y João Carlos dos Santos Silva e Pereira de Lima (Pa)

**Nº de investigadores/as:** 9

**Entidad/es financiadora/s:**

Ministerio de Ciencia e Innovación

**Tipo de entidad:** Acciones integradas

**Ciudad entidad financiadora:** Madrid, Comunidad de Madrid, España

**Fecha de inicio:** 01/01/2009

**Duración:** 2 años



**Cuantía total:** 8.000 €

- 11 Nombre del proyecto:** Desarrollo de métodos quimo-enzimáticos para la síntesis estereoselectiva de iminociclitos activos frente a glicosidasas y glicosiltransferasas.  
**Entidad de realización:** Instituto de Investigaciones Químicas y Ambientales de Barcelona-CSIC  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Pere Clapés Saborit  
**Nº de investigadores/as:** 7  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Ministerio de Educación y Ciencia. CTQ2005-00063/BQU  
**Fecha de inicio:** 01/01/2007 **Duración:** 3 años  
**Cuantía total:** 121.000 €
- 12 Nombre del proyecto:** Desarrollo de métodos quimo-enzimáticos para la síntesis estereoselectiva de iminociclitos activos frente a glicosidasas y glicosiltransferasas.  
**Modalidad de proyecto:** De investigación fundamental (incluyendo excavaciones arqueológicas, etc.).  
**Entidad de realización:** Instituto de Investigaciones Químicas y Ambientales de Barcelona-CSIC  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Pere Clapés Saborit  
**Nº de investigadores/as:** 7  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Ministerio de Educación y Ciencia. (Acción Puente)  
**Fecha de inicio:** 01/01/2006 **Duración:** 1 año  
**Cuantía total:** 6.000 €
- 13 Nombre del proyecto:** Estudio y Desarrollo de aldolasas en síntesis estereoselectiva de iminociclitos activos frente a glicosidasas y glicosiltransferasas.  
**Entidad de realización:** Instituto de Investigaciones Químicas y Ambientales de Barcelona-CSIC  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Pere Clapés Saborit  
**Nº de investigadores/as:** 7  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Ministerio de Educación y Ciencia. Acción Complementaria CTQ2005-25182-E  
**Fecha de inicio:** 01/01/2006 **Duración:** 1 año  
**Cuantía total:** 27.000 €
- 14 Nombre del proyecto:** Ajuts Suport a Grup de recerca consolidats: Química teòrica i computacional.  
**Entidad de realización:** Facultad de Química (Universitat de Barcelona) e IIQAB (CSIC).  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Santiago Olivella Nello.  
**Nº de investigadores/as:** 9  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Generalitat de Catalunya. Ref: 2005SGR00111  
**Fecha de inicio:** 01/01/2005 **Duración:** 4 años  
**Cuantía total:** 41.000 €
- 15 Nombre del proyecto:** Computer aided investigation of aldolase reactivity and stereoselectivity. Modelling of new mutated enzymes. (MERC-CT-2004-513609)  
**Entidad de realización:** CSIC  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Ramon Crehuet Simon  
**Nº de investigadores/as:** 1  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Unión Europea



**Fecha de inicio:** 01/01/2004  
**Cuantía total:** 40.000 €

**Duración:** 2 años

**16 Nombre del proyecto:** Estudio teórico de mecanismos de reacción de interés en química atmosférica (PB98-1240-C02-02)

**Entidad de realización:** CSIC

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Josep Maria Anglada Rull

**Nº de investigadores/as:** 2

**Entidad/es financiadora/s:**  
DGYCIT

**Fecha de inicio:** 12/01/1999  
**Cuantía total:** 41.470 €

**Duración:** 3 años

**17 Nombre del proyecto:** Química troposférica de compuestos orgánicos aromáticos. (PB95-0278-C02-02)

**Entidad de realización:** CSIC

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Josep Maria Anglada Rull

**Nº de investigadores/as:** 2

**Entidad/es financiadora/s:**  
DGYCIT

**Fecha de inicio:** 01/11/1996  
**Cuantía total:** 31.396 €

**Duración:** 3 años

### Contratos, convenios o proyectos de I+D+i no competitivos con Administraciones o entidades públicas o privadas

**Nombre del proyecto:** Non-globular proteins

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Grado de contribución:** Investigador/a

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Silvio Tossato

**Entidad/es financiadora/s:**  
COST action

**Nombre del programa:** COST action

**Fecha de inicio:** 26/03/2015

**Duración:** 4 años



## Actividades científicas y tecnológicas

### Producción científica

Índice H: 19

Fecha de aplicación: 20/10/2017

#### Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1 Albert Escobedo; Busra Topal; Micha Ben Achim Kunze; Juan Aranda; Giulio Chiesa; Daniele Mungianu; Ganeko Bernardo-Seisedos; Bahareh Eftekhazadeh; Margarida Gairi; Roberta Pieratelli; Isabella Felli; Tammo Diercks; Oscar Millet; Jesus Garcia; Modesto Orozco; Ramon Crehuet; Kresten Lindorff-Larsen; Xavier Salvatella. Side chain to main chain hydrogen bonds stabilize a polyglutamine helix in the activation domain of a transcription factor. *Nature Commun.* Accept in Principle, 2019. Disponible en Internet en: <<https://go.nature.com/2He3sEn>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Autor de correspondencia:** Si
- 2 J.M. Anglada; R. Crehuet; A. Solé. The gas phase oxidation of HCOOH by Cl and NH radicals. Proton coupled electron transfer versus hydrogen atom transfer \*. *Molecular Physics.* 2019. Disponible en Internet en: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85059960251&doi=10.1080%2f00268976.2018.1554829&partnerID=40&md5=0a0a61c2f160b3f603418b3f0621c>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 3 A. Alagia; A.F. Jorge; A. Aviñó; T.F.G.G. Cova; R. Crehuet; S. Grijalvo; A.A.C.C. Pais; R. Eritja. Exploring PAZ/3'-overhang interaction to improve siRNA specificity. A combined experimental and modeling study. *Chemical Science.* 9 - 8, pp. 2074 - 2086. 2018. Disponible en Internet en: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85042610463&doi=10.1039%2fc8sc00010g&partnerID=40&md5=39d47b81bcae14e4bd226f7ca794842b>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 4 M. De March; S. Barrera-Vilarmau; E. Crespan; E. Mentegari; N. Merino; A. Gonzalez-Magaña; M. Romano-Moreno; G. Maga; R. Crehuet; S. Onesti; F.J. Blanco; A. De Biasio. P15PAF binding to PCNA modulates the DNA sliding surface. *Nucleic Acids Research.* 46 - 18, pp. 9816 - 9828. 2018. Disponible en Internet en: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85054894672&doi=10.1093%2fnar%2fgky723&partnerID=40&md5=2696c625ed3e850c0f2304879d9c61c1>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 5 J.M. Anglada; R. Crehuet; S. Adhikari; J.S. Francisco; Y. Xia. Reactivity of hydropersulfides toward the hydroxyl radical unraveled: Disulfide bond cleavage, hydrogen atom transfer, and proton-coupled electron transfer. *Physical Chemistry Chemical Physics.* 20 - 7, pp. 4793 - 4804. 2018. Disponible en Internet en: <<https://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85042141757&doi=10.1039%2fc7cp07570g&partnerID=40&md5=282bc9620550231ead3007d01e619d1e>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 6 T.N. Cordeiro; P.-C. Chen; A. De Biasio; N. Sibille; F.J. Blanco; J.S. Hub; R. Crehuet; P. Bernadó. Disentangling polydispersity in the PCNA-p15 PAF complex, a disordered, transient and multivalent macromolecular assembly. *Nucleic Acids Res.* 5, pp. 1501 - 1515. 2017. Disponible en Internet en: <<http://www.scopus.com/inward/record.uri?eid=2-s2.0-85014417906&partnerID=MN8TOARS>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



- 7** Matteo De March; Nekane Merino; Susana Barrera-Vilarmau; Ramon Crehuet; Silvia Onesti; Francisco J. Blanco; Alfredo De Biasio. Structural basis of human PCNA sliding on DNA. *Nature Comm.*8, pp. 13935. 2017.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Autor de correspondencia:** No
- 8** J.M. Anglada; R. Crehuet; M. Martins-Costa; J.S. Francisco; M. Ruiz-Lopez. The atmospheric oxidation of CH<sub>3</sub>OOH by the OH radical: the effect of water vapor. *Phys. Chem. Chem. Phys.*19 - 19, pp. 12331 - 12342. 2017. Disponible en Internet en: <<http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-84996599643&partnerID=MN8TOARS>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 4.1
- 9** Aroa Dominguez; Marc Puigmartí; M. Pilar Bosch; Gloria Rosell; Ramon Crehuet; Antonio Ortiz; Carmen Quero; Angel Guerrero. Synthesis, Functional Assays, Electrophysiological Activity and Field Tests of Pheromone Antagonists of the Tomato Leafminer *Tuta absoluta*. *J. Agric. Food Chem.*64 - 18, pp. 3523 - 3532. 2016.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Autor de correspondencia:** No
- 10** J.M. Anglada; R. Crehuet; J.S. Francisco. The Stability of  $\alpha$ -Hydroperoxyalkyl Radicals. *Chem. Eur. J.*22 - 50, pp. 18092 - 18100. 2016. Disponible en Internet en: <<http://www.scopus.com/inward/record.url?eid=2-s2.0-84996599643&partnerID=MN8TOARS>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Autor de correspondencia:** No
- 11** Melchor Sanchez-Martinez; Martin Field; Ramon Crehuet. Enzymatic Minimum Free Energy Path Calculations Using Swarms of Trajectories. *J. Phys. Chem. B.* 119 - 3, pp. 1103 - 1113. 2015.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Autor de correspondencia:** Si
- 12** Melchor Sanchez-Martinez; Ramon Crehuet. Application of the maximum entropy principle to determine ensembles of intrinsically disordered proteins from residual dipolar couplings. *Phys. Chem. Chem. Phys.*16, pp. 26030 - 26039. 2014.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Autor de correspondencia:** Si
- 13** Ramon Crehuet; David Mormeneo; Josep M. Anglada; Antonio Delgado. Mechanistic Studies on the Intramolecular Cyclization of O-Tosyl Phytosphingosines to Jaspines. *Nat. Prod. Commun.*9 - 8, pp. 1087 - 1090. 2014.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 14** Melchor Sanchez-Martinez; Enrique Marcos; Roma Tauler; Martin J. Field; Ramon Crehuet. Conformational Compression and Barrier Height Heterogeneity in the N-Acetylglutamate Kinase. *J. Phys. Chem. B.* 117 - 46, pp. 14261 - 14272. 2013.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Autor de correspondencia:** Si
- 15** Jelisa Iglesias; Melchor Sanchez-Martinez; Ramon Crehuet. SS-map: Visualizing cooperative secondary structure elements in protein ensembles. *Intrinsically Disordered Proteins.* 1, pp. 40 - 45. 2013.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Autor de correspondencia:** Si





- 16** Laura Rodriguez; Montserrat Ferrer; Ramon Crehuet; Josep Anglada; Joao Carlos Lima. Correlation between Photophysical Parameters and Gold-Gold Distances in Gold(I) (4-Pyridyl)ethynyl Complexes. *Inorg. Chem.* 51 - 14, pp. 7636 - 7641. 2012.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Autor de correspondencia:** No
- 17** Enrique Marcos; Aurora Jimenez; Ramon Crehuet. Dynamic fingerprints of protein thermostability revealed by long molecular dynamics. *J. Comput. and Theor. Chem.* 8 - 3, pp. 1129 - 1142. 2012.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Autor de correspondencia:** Si  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 5,1
- 18** Enrique Marcos; Ramon Crehuet; Ivet Bahar. Changes in Dynamics upon Oligomerization Regulate Substrate Binding and Allostery in Amino Acid Kinase Family Members. *PLoS Comput. Biol.* 7 - 9, pp. e1002201. 2011. ISSN 1553-734X  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Autor de correspondencia:** Si  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 5,5
- 19** Enrique Marcos; Pau Mestres; Ramon Crehuet. Crowding Induces Differences in the Diffusion of Thermophilic and Mesophilic Proteins: A New Look at Neutron Scattering Results. *Biophys. J.* 101 - 11, pp. 2782 - 2789. 2011. ISSN 0006-3495  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Autor de correspondencia:** Si  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 4,2
- 20** Xavier Garrabou; Jesus Joglar; Teodor Parella; Ramon Crehuet; Jordi Bujons; Pere Clapes. Redesign of the Phosphate Binding Site of L-Rhamnulose-1-Phosphate Aldolase towards a Dihydroxyacetone Dependent Aldolase. *Adv. Synth. & Catal.* 353 - 1, pp. 89 - 99. 2011. ISSN 1615-4150  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Autor de correspondencia:** No  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 5,6
- 21** Javier Gonzalez; Marc Caballero; Antoni Aguilar-Mogas; Miquel Torrent-Sucarrat; Ramon Crehuet; Albert Sole; Xavier Gimenez; Santiago Olivella; Josep M. Bofill; Josep M. Anglada. The reaction between HO and (H<sub>2</sub>O) (n) (n=1, 3) clusters: reaction mechanisms and tunneling effects. *Theor. Chem. Acc.* 128 - 4-6, pp. 579 - 592. 2011. ISSN 1432-881X  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Autor de correspondencia:** No  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 2,9
- 22** Enrique Marcos; Ramon Crehuet; Ivet Bahar. On the Conservation of the Slow Conformational Dynamics within the Amino Acid Kinase Family: NAGK the Paradigm. *PLoS Comput. Biol.* 6 - 4, pp. e1000738. 2010. ISSN 1553-734X





**Tipo de producción:** Artículo científico

**Autor de correspondencia:** Si

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 5,9

**Tipo de soporte:** Revista

- 23** Enrique Marcos; Martin J. Field; Ramon Crehuet. Pentacoordinated phosphorus revisited by high-level QM/MM calculations. *Proteins*. 78 - 11, pp. 2405 - 2411. 2010. ISSN 0887-3585

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Autor de correspondencia:** Si

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 3,4

- 24** Maria F. Gonzalez; Antoni Aguilar-Mogas; Javier Gonzalez; Ramon Crehuet; Josep M. Anglada; Josep Maria Bofill; Xavier Gimenez. A Bohmian total potential view to quantum effects. II: decay of temporarily trapped states. *Theor. Chem. Acc.* 123 - 1-2, pp. 51 - 58. 2009. ISSN 1432-881X

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Autor de correspondencia:** No

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 2,5

- 25** Bruno Pedras; Elisabete Oliveira; Hugo Santos; Laura Rodriguez; Ramon Crehuet; Teresa Aviles; Jose Luis Capelo; Carlos Lodeiro. A new tripodal poly-imine indole-containing ligand: Synthesis, complexation, spectroscopic and theoretical studies. *Inorg. Chem. Acta.* 362 - 8, pp. 2627 - 2635. 2009. ISSN 0020-1693

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Autor de correspondencia:** Si

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 1,9

- 26** Aurora Jimenez; Pere Clapes; Ramon Crehuet. Protein Flexibility and Metal Coordination Changes in DHAP-Dependent Aldolases. *Chem. Eur. J.* 15 - 6, pp. 1422 - 1428. 2009. ISSN 0947-6539

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Autor de correspondencia:** Si

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 5,4

- 27** Jordi Escabros; Ramon Crehuet; Angel Messeguer. Studies on the Toxic Oil Syndrome: proposal of a mechanism for the thermal conversion of 3-N-phenylamino-1,2-propanediol esters into anilides under deodorisation conditions. *Tetrahedron*. 65 - 1, pp. 418 - 426. 2009. ISSN 0040-4020

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Autor de correspondencia:** No

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 2,9

- 28** Aurora Jimenez; Pere Clapes; Ramon Crehuet. A dynamic view of enzyme catalysis. *J. Mol. Model.* 14 - 8, pp. 735 - 746. 2008. ISSN 1610-2940

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Autor de correspondencia:** Si

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)



**Índice de impacto:** 2,0

- 29** Enrique Marcos; Josep M. Anglada; Ramon Crehuet. Description of pentacoordinated phosphorus under an external electric field: which basis sets and semi-empirical methods are needed?. Phys. Chem. Chem. Phys.10 - 18, pp. 2442 - 2450. 2008. ISSN 1463-9076  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Autor de correspondencia:** Si  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 4,1
- 30** Enrique Marcos; Ramon Crehuet; Josep M. Anglada. Inductive and external electric field effects in pentacoordinated phosphorus compounds. J. Chem. Theor. Comput.4 - 1, pp. 49 - 63. 2008. ISSN 1549-9618  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Autor de correspondencia:** Si  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 4,3
- 31** Laura Rodriguez; Carlos Lodeiro; Joao Carlos Lima; Ramon Crehuet. Neutral gold(I) metallosupramolecular compounds: Synthesis and characterization, photophysical properties, and density functional theory studies. Inorg. Chem.47 - 11, pp. 4952 - 4962. 2008. ISSN 0020-1669  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Autor de correspondencia:** No  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 4,1
- 32** Ramon Crehuet; Martin J. Field. A transition path sampling study of the reaction catalyzed by the enzyme chorismate mutase. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 111 - 20, pp. 5708 - 5718. 2007. ISSN 1520-6106  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 4,1
- 33** A. Aguilar-Mogas; R. Crehuet; X. Gimenez; J. M. Bofill. Applications of analytic and geometry concepts of the theory of calculus of variations to the Intrinsic Reaction Coordinate model. MOLECULAR PHYSICS. 105 - 19-22, pp. 2475 - 2492. 2007. ISSN 0026-8976  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 1,7
- 34** Aurora Jimenez; Ramon Crehuet. Can the MaxFlux algorithm describe bifurcating paths?. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 118 - 4, pp. 769 - 775. 2007. ISSN 1432-881X  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 2,5
- 35** J Calveras; J Bujons; T Parella; R Crehuet; L Espelt; J Joglar; P Clapes. Influence of N-amino protecting group on aldolase-catalyzed aldol additions of dihydroxyacetone phosphate to amino aldehydes. TETRAHEDRON. 62 - 11, pp. 2648 - 2656. 03/2006. ISSN 0040-4020  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista



**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 2,8

- 36** R Crehuet; A Thomas; MJ Field. An implementation of the nudged elastic band algorithm and application to the reaction mechanism of HGXPRTase from Plasmodium falciparum. JOURNAL OF MOLECULAR GRAPHICS & MODELLING. 24 - 2, pp. 102 - 110. 10/2005. ISSN 1093-3263

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 2,4

- 37** R Crehuet; JM Bofill. The reaction path intrinsic reaction coordinate method and the Hamilton-Jacobi theory. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 122 - 23, 06/2005. ISSN 0021-9606

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 3,1

- 38** R Crehuet; MJ Field; E Pellegrini. Transition events in one dimension. PHYSICAL REVIEW E. 69 - 1, Part 1, 01/2004. ISSN 1539-3755

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 2,4

- 39** R Crehuet; MJ Field. A temperature-dependent nudged-elastic-band algorithm. JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS. 118 - 21, pp. 9563 - 9571. 06/2003. ISSN 0021-9606

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 3,0

- 40** R Crehuet; MJ Field. Comment on "Action-derived molecular dynamics in the study of rare events". PHYSICAL REVIEW LETTERS. 90 - 8, 2003. ISSN 0031-9007

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 7,1

- 41** R Crehuet; JM Anglada; D Cremer; JM Bofill. Reaction modes of carbonyl oxide, dioxirane, and methylenebis(oxy) with ethylene: A new reaction mechanism. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A. 106 - 15, pp. 3917 - 3929. 04/2002. ISSN 1089-5639

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 2,9

- 42** R Crehuet; JM Bofill; JM Anglada. A new look at the reduced-gradient-following path. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS. 107 - 3, pp. 130 - 139. 02/2002. ISSN 1432-881X

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 2,4



- 43** D Cremer; E Kraka; R Crehuet; J Anglada; J Grafenstein. The ozone-acetylene reaction: concerted or non-concerted reaction mechanism? A quantum chemical investigation. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 347 - 1-3, pp. 268 - 276. 10/2001. ISSN 0009-2614  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 2,5
- 44** D Cremer; R Crehuet; J Anglada. The ozonolysis of acetylene - A quantum chemical investigation. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 123 - 25, pp. 6127 - 6141. 06/2001. ISSN 0002-7863  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 6,7
- 45** R Crehuet; JM Anglada; JM Bofill. Tropospheric formation of hydroxymethyl hydroperoxide, formic acid, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, and OH from carbonyl oxide in the presence of water vapor: A theoretical study of the reaction mechanism. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 7 - 10, pp. 2227 - 2235. 05/2001. ISSN 0947-6539  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 4,6
- 46** JM Anglada; E Besalu; JM Bofill; R Crehuet. On the quadratic reaction path evaluated in a reduced potential energy surface model and the problem to locate transition states. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 22 - 4, pp. 387 - 406. 03/2001. ISSN 0192-8651  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 2,8
- 47** JM Anglada; C Bo; JM Bofill; R Crehuet; JM Poblet. Inductive effects in neutral pentacoordinated silicon compounds containing a Si <- N dative bond. A theoretical study. ORGANOMETALLICS. 18 - 26, pp. 5584 - 5593. 12/1999. ISSN 0276-7333  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3,6
- 48** JM Anglada; E Besalu; JM Bofill; R Crehuet. Prediction of approximate transition states by Bell-Evans-Polanyi principle: I. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 20 - 11, pp. 1112 - 1129. 08/1999. ISSN 0192-8651  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 2,8
- 49** JM Anglada; E Besalu; JM Bofill; R Crehuet. Prediction of approximate transition states by Bell-Evans-Polanyi principle: II. Gas phase unimolecular decomposition of methyldioxirane. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 20 - 11, pp. 1130 - 1137. 08/1999. ISSN 0192-8651  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 2,8



- 50** JM Anglada; R Crehuet; JM Bofill. The ozonolysis of ethylene: A theoretical study of the gas-phase reaction mechanism. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 5 - 6, pp. 1809 - 1822. 06/1999. ISSN 0947-6539  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 4,8
- 51** X Querol; R Crehuet; A Alastuey; A López-Soler; J L Fernández-Turiel; F Plana; J A Puigercus. Geoquímica y mineralogía aplicadas al estudio del impacto ambiental derivado de la combustión del carbón. Acta Geológica Hispánica. 30, pp. 145 - 153. 1995.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- 52** Enrique Marcos; Melchor Sanchez-Martinez; Ramon Crehuet. Interplay between Enzyme Function and Protein Dynamics. Computational Approaches to Protein Dynamics: From Quantum to Coarse-Grained Methods. CRC Press, 2015. Disponible en Internet en: <<http://www.crcpress.com/product/isbn/9781466561571>>. ISBN 978-1-4665-6157-1  
**Colección:** Series in Computational Biophysics  
**Tipo de producción:** Capítulo de libro **Tipo de soporte:** Libro
- 53** Josep Maria Bofill; Josep Maria Anglada; Emili Besalú; Ramon Crehuet. Quantum Chemical Reactivity: Beyond the Study of Small Molecules. Fundamentals of Molecular Similarity. pp. 125 - 141. Springer, 2001. Disponible en Internet en: <[http://link.springer.com/chapter/10.1007%2F978-1-4757-3273-3\\_9](http://link.springer.com/chapter/10.1007%2F978-1-4757-3273-3_9)>. ISBN 978-1-4419-3344-7  
**DOI:** 10.1007/978-1-4757-3273-3\_9  
**Colección:** Mathematical and Computational Chemistry  
**Tipo de producción:** Capítulo de libro **Tipo de soporte:** Libro

## Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **Título del trabajo:** The subtle pressure dependence of Intrinsically Disordered Proteins  
**Nombre del congreso:** Disordered protein segments: revisiting the structure-function paradigm  
**Tipo evento:** Congreso  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Autor de correspondencia:** Si  
**Ciudad de celebración:** Paris, Francia  
**Fecha de celebración:** 03/10/2017  
**Fecha de finalización:** 06/10/2015  
**Entidad organizadora:** CECAM  
Susana Barrera-Vilarmau; Nathalie Sibille; Pau Bernadó; Ramon Crehuet. Disponible en Internet en: <<https://www.cecarn.org/workshop-3-1373.html>>.
- 2** **Título del trabajo:** Are intrinsically disordered proteins sensitive to hydrostatic pressure?  
**Nombre del congreso:** 19th IUPAB and 11th EBSA congress  
**Tipo evento:** Congreso  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Autor de correspondencia:** Si  
**Ciudad de celebración:** Edimburgh, Reino Unido  
**Fecha de celebración:** 16/07/2017  
**Fecha de finalización:** 20/07/2017  
**Entidad organizadora:** International Union of Pure and Applied Biophysics (IUPAB) and European Biophysical Societies' Association (EBSA)



Susana Barrera-Vilarmau; Nathalie Sibille; Pau Bernadó; Ramon Crehuet. Disponible en Internet en: <http://www.iupab2017.org/programme>.

- 3** **Título del trabajo:** Integrating RDC data into simulated IDPs ensembles  
**Nombre del congreso:** 10th European Biophysics Congress  
**Tipo evento:** Congreso  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Autor de correspondencia:** Si  
**Ciudad de celebración:** Dresden, Alemania  
**Fecha de celebración:** 18/07/2015  
**Fecha de finalización:** 22/07/2015  
**Entidad organizadora:** European Biophysical Society  
Ramon Crehuet; Melchor Sanchez-Martinez; Susana Barrera-Vilarmau.
- 4** **Título del trabajo:** Integrating RDC data into simulated IDPs ensembles  
**Nombre del congreso:** Computational Aspects - Biomolecular NMR  
**Tipo evento:** Congreso  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Autor de correspondencia:** Si  
**Ciudad de celebración:** Zurich, Toscana, Italia  
**Fecha de celebración:** 07/06/2015  
**Fecha de finalización:** 12/06/2015  
**Entidad organizadora:** Gordon Research Conference  
**Tipo de entidad:** Fundación  
**Ciudad entidad organizadora:** Estados Unidos de América  
Ramon Crehuet; Melchor Sanchez-Martinez; Susana Barrera-Vilarmau.
- 5** **Título del trabajo:** Invited lecturer  
**Nombre del congreso:** pDynamo Workshop & Molecular Simulation  
**Ciudad de celebración:** Sao Paulo, Brasil  
**Fecha de celebración:** 21/11/2013  
**Fecha de finalización:** 23/12/2013  
**Entidad organizadora:** Universidade de Sao Paulo
- 6** **Título del trabajo:** Simulating Intrinsically Disordred Proteins with coarse-grained methods  
**Nombre del congreso:** Barcelona Biomed conferences: Frontiers in dynamics simulations of biological molecules  
**Ciudad de celebración:** Barcelona, Cataluña, España  
**Fecha de celebración:** 04/11/2013  
**Fecha de finalización:** 06/11/2013  
**Entidad organizadora:** Instituto de Investigación Biomédica  
**Tipo de entidad:** Instituto Universitario de Investigación
- 7** **Título del trabajo:** Visualizing and re-weighting ensembles of IDPs: SS-map and maximum entropy principle applied to fit RDC data  
**Nombre del congreso:** Intrinsically Disordred Proteins: connecting computation, physics and biology  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Zurich, Suiza  
**Fecha de celebración:** 02/09/2013  
**Fecha de finalización:** 13/09/2013  
**Entidad organizadora:** CECAM





**Tipo de entidad:** Organismo Público de Investigación

**Ciudad entidad organizadora:** Lausanne, Suiza  
Ramon Crehuet; Jelisa Iglesias; Melchor Sanchez-Martinez.

- 8 Título del trabajo:** Proteins in motion: comparing a thermophilic-mesophilic pair of proteins with Neutron Scattering techniques and multi-scale modelling  
**Nombre del congreso:** Barcelona BioMed Seminars  
**Tipo evento:** Seminario  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Barcelona, Cataluña, España  
**Fecha de celebración:** 08/11/2012  
**Entidad organizadora:** Instituto de Investigación Biomédica  
Ramon Crehuet. **Tipo de entidad:** Instituto Universitario de Investigación
- 9 Título del trabajo:** Interpreting protein dynamics with neutron scattering data  
**Nombre del congreso:** CECAM workshop: Combining Experimental and Computational Techniques to Study Protein Behavior  
**Ciudad de celebración:** Lugano, Suiza  
**Fecha de celebración:** 26/09/2012  
**Fecha de finalización:** 29/09/2012  
**Entidad organizadora:** CECAM
- 10 Título del trabajo:** Catalytic role of protein motions in NAG kinase  
**Nombre del congreso:** International Congress of the Spanish Biophysical Society  
**Ciudad de celebración:** Barcelona, Cataluña, España  
**Fecha de celebración:** 03/07/2012  
**Fecha de finalización:** 06/07/2012  
**Entidad organizadora:** Sociedad Española de Biofísica
- 11 Título del trabajo:** Does "conformational compression" help enzyme catalysis?  
**Nombre del congreso:** VIIIth Congress on Electronic Structure: Principles and Applications ESPA 2012  
**Ciudad de celebración:** Barcelona, Cataluña, España  
**Fecha de celebración:** 26/06/2012  
**Fecha de finalización:** 29/06/2012  
**Entidad organizadora:** ESPA 2012  
Ramon Crehuet; Melchor Sanchez-Martinez; Enrique Marcos; Martin J. Field.
- 12 Título del trabajo:** How can a Thermophilic protein be more mobile than its mesophilic homologue?  
**Nombre del congreso:** WATOC 2011 (Ninth Triennial Congress of The World Association of Theoretical and Computational Chemists)  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Santiago de Compostela,  
**Fecha de celebración:** 2011  
E. Marcos; R. Crehuet.
- 13 Título del trabajo:** Interpreting protein dynamics with neutron scattering data: not all a bed of roses  
**Nombre del congreso:** Combining Experimental and Computational Techniques to Study Protein Behavior (CECAM workshop)  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)





**Ciudad de celebración:** Lugano, Suiza,

**Fecha de celebración:** 2011

R. Crehuet.

- 14** **Título del trabajo:** Tryptophan mediated decarboxylation caused by X-ray damage in LDH under crystallographic condition  
**Nombre del congreso:** WATOC 2011 (Ninth Triennial Congress of The World Association of Theoretical and Computational Chemists)  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Santiago de Compostela,  
**Fecha de celebración:** 2011  
M. Sánchez; R. Crehuet.
- 15** **Título del trabajo:** Can computer simulations and neutron scattering live in harmony?  
**Nombre del congreso:** nDDB workshop  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Grenoble, Francia,  
**Fecha de celebración:** 2010  
R. Crehuet.
- 16** **Título del trabajo:** Can we include protein flexibility when computing reaction mechanisms?  
**Nombre del congreso:** EMBO Conference series: Catalytic Mechanisms by Biological Systems: At the interface between chemistry and biology.  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Hamburgo, Alemania,  
**Fecha de celebración:** 2010  
R. Crehuet.
- 17** **Título del trabajo:** On the preservation of the slow conformational dynamics within the Amino acid kinase Family.  
**Nombre del congreso:** Theoretical Chemistry: modeling reactivity from gas phase to biomolecules and solids  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Barcelona,  
**Fecha de celebración:** 2009  
E. Marcos; V. Rubio; I. Bahar; R. Crehuet.
- 18** **Título del trabajo:** On the relationship between flexibility and thermostability: a molecular dynamics study on a thermophilic-mesophilic pair of enzymes  
**Nombre del congreso:** Expanding the frontiers of molecular dynamics simulations in biology  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Barcelona,  
**Fecha de celebración:** 2009  
E. Marcos; A. Jiménez; R. Crehuet.
- 19** **Título del trabajo:** Unexpected correlations between Au...Au distances and luminescence lifetimes  
**Nombre del congreso:** 8th Inorganic Chemistry Conference  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Curia, Portugal  
**Fecha de celebración:** 2009  
J. C. Lima; L. Rodríguez; M. Ferrer; R. Crehuet.



- 20 Título del trabajo:** A dynamic view of enzyme catalysis  
**Nombre del congreso:** Modelling interactions in biomolècules III  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Praga, República Checa  
**Fecha de celebración:** 2007  
R. Crehuet. "Aurora Jiménez , Pere Clapés, Ramon Crehuet, A dynamic view of enzyme catalysis, J. Mol. Model. , 2008, 14, 735-746".
- 21 Título del trabajo:** Flexibility and energy flow in enzyme active sites. A transition path sampling study of chorismate mutase.  
**Nombre del congreso:** USGEB 2007. From Euler to Computational Biology: Integrating mathematics into biological research  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Basel, Suiza  
**Fecha de celebración:** 2007  
R. Crehuet; M. J. Field.
- 22 Título del trabajo:** Intramolecular electron transfer in paramagnetic donor-acceptor organic radicals: solvent tuning from normal to inverted Marcus region,  
**Nombre del congreso:** 10th International Conference on molecule-based magnets  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Victoria, Canadá  
**Fecha de celebración:** 2006  
I. Ratera; C. Sporer; L. Perls; R. Crehuet; S.G. Boxer; J. Veciana.
- 23 Título del trabajo:** QM/MM Study Of The Acylation Mechanism In Penicillin-Binding Protein 2x From Streptococcus Pneumoniae  
**Nombre del congreso:** Modelling Chemical Reactivity: From Gas-Phase To Solution And Enzymes  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Nancy, Francia  
**Fecha de celebración:** 2003  
R. Crehuet; M. Oliva; O. Dideberg; M. J. Field.
- 24 Título del trabajo:** Hypoxanthine-Guanine-Xanthine Phosphoribosyl Transferase: A Theoretical Study On The Reaction Mechanism  
**Nombre del congreso:** Computational Biophysics: Integrating Theoretical Physics And Biology.  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** St. Feliu de Guíxols, España  
**Fecha de celebración:** 2002  
R. Crehuet; A. Thomas; M. J. Field.
- 25 Título del trabajo:** Simulating Chemical Reactions  
**Nombre del congreso:** Developing A Scientific Carieer  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Donostia, España  
**Fecha de celebración:** 2002  
R. Crehuet.



- 26 Título del trabajo:** A theoretical study on the tropospheric formation of OH radical from the alkene ozonolysis under humid conditions  
**Nombre del congreso:** Electronic Structure and Chemical Reactivity  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Bellaterra, España  
**Fecha de celebración:** 2001  
J. M. Anglada; J. M. Bofill; R. Crehuet; P. Applincourt; D. Cremer.

## Gestión de I+D+i y participación en comités científicos

### Organización de actividades de I+D+i

- 1 Título de la actividad:** 11th European Conference on Theoretical and Computational Chemistry  
**Tipo de actividad:** Congreso Internacional  
**Ciudad de celebración:** Barcelona, Cataluña, España  
**Entidad convocante:** European Chemical Sciences (EuChemS)  
**Modo de participación:** Organizador  
**Fecha de inicio-fin:** 04/09/2017 - 07/09/2017
- 2 Título de la actividad:** XXX Reunió de la Xarxa de Referència de Química Teòrica i Computacional  
**Ámbito geográfico:** Autonómica  
**Ciudad de celebración:** Barcelona, Cataluña, España  
**Entidad convocante:** INSTITUTO DE QUIMICA AVANZADA DE CATALUÑA **Tipo de entidad:** Agencia Estatal  
**Ciudad entidad convocante:** Barcelona, Cataluña, España  
**Modo de participación:** Organizador  
**Nº de asistentes:** 120  
**Fecha de inicio-fin:** 26/06/2014 - 27/06/2014 **Duración:** 2 días
- 3 Título de la actividad:** Jornada de Catalana de Supercomputación 2011 (JOCS 2011)  
**Tipo de actividad:** Workshop  
**Ciudad entidad convocante:** Barcelona, Cataluña, España  
**Modo de participación:** Organizador  
**Fecha de inicio:** 2011
- 4 Título de la actividad:** Python applied to Computational Chemistry and Molecular Modelling  
**Tipo de actividad:** Escuela de Verano **Ámbito geográfico:** Autonómica  
**Ciudad entidad convocante:** Barcelona, Cataluña, España  
**Modo de participación:** Organizador  
**Fecha de inicio:** 2010
- 5 Título de la actividad:** Theoretical Chemistry: Modeling reactivity from gas phase to biomolecules and solids  
**Tipo de actividad:** Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Ciudad entidad convocante:** Barcelona, Cataluña, España  
**Modo de participación:** Organizador  
**Fecha de inicio:** 2009



## Otros méritos

### Estancias en centros de I+D+i públicos o privados

**Entidad de realización:** Universidad de Copenhague **Tipo de entidad:** Universidad  
**Facultad, instituto, centro:** Biocenter  
**Ciudad entidad realización:** Copenhague, Dinamarca  
**Fecha de inicio-fin:** 01/08/2018 - 30/06/2019 **Duración:** 11 meses  
**Objetivos de la estancia:** Invitado/a

### Premios, menciones y distinciones

- 1 Descripción:** El artículo Marcos E, et al. Biophys J, 2011 fue seleccionado para un "New & Notable"  
**Entidad concesionaria:** Biophysical Journal  
**Fecha de concesión:** 2011
- 2 Descripción:** Premio Extraordinario de Doctorado  
**Entidad concesionaria:** Universitat de Barcelona **Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de concesión:** 31/07/2001
- 3 Descripción:** Premio Extraordinario de Licenciatura  
**Entidad concesionaria:** Universitat de Barcelona **Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de concesión:** 30/07/1999

### Períodos de actividad investigadora

**Nº de tramos reconocidos:** 3  
**Entidad acreditante:** Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva **Tipo de entidad:** Gubernamental  
**Fecha de obtención:** 2015