



Comisión Interministerial de Ciencia y Tecnología

Curriculum vitae

Nombre: Gregori Ujaque Pérez

Fecha: Noviembre - 2025

Situación profesional actual

Organismo: Universidad Autónoma de Barcelona
Facultad, Escuela o Instituto: Facultad de Ciencias
Depto./Secc./Unidad estr.: Departamento de Química, Unidad de Química Física
Dirección postal: 08193, Cerdanyola del Vallès

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión):

Fax:

Correo electrónico: gregori.ujaque@uab.cat

Especialización (Códigos UNESCO): 221001, 221003, 221001-1, 230314, 230315, 230316, 230321, 230331, 230611, 230615

Categoría profesional: Profesor Titular

Fecha de inicio: 24-12-2007

Situación administrativa

☒ Plantilla

☐ Contratado

☐ Interino

☐ Becario

☐ Otras situaciones especificar:

Dedicación

A tiempo completo ☒

A tiempo parcial ☐

Líneas de investigación

Breve descripción, por medio de palabras claves, de la especialización y líneas de investigación actuales.

Química Computacional, Química Cuántica, Métodos Híbridos QM/MM, Dinámica Molecular Ab Initio, Catálisis Homogénea, Catálisis Asimétrica, Química Organometálica, , Mecanismos de Reacción, Complejos de Metales de Transición, Reactividad Química, *Host-Guest*, Reconocimiento Molecular, Química Supramolecular.

Formación Académica

Titulación Superior	Centro	Fecha
Licenciado Ciencias Químicas	Universidad Autónoma de Barcelona	1994

Doctorado	Centro	Fecha
Doctor Ciencias Químicas	Universidad Autónoma de Barcelona	1999

Actividades anteriores de carácter científico profesional

Puesto	Institución	Fechas
Asociado A4.6	UAB	1994-94
Asociado A3.6	UAB	1995-95
Profesor Ayudante	UAB	1995-96
Asociado A4.5	UAB	1996-97
Profesor Ayudante	UAB	1997-98
Asociado A4.6	UAB	1998-99
Becario Postdoctoral	UCLA	1999-01
Becario	UAB	2001-03
Investigador Ramon y Cajal	UAB	2003-07
Profesor Agregado	UAB	2007-10
Profesor Titular	UAB	2010-...

Idiomas (R = regular, B = bien, C = correctamente)

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Inglés	C	C	C
Francés	R	B	R

Participación en Proyectos de I+D financiados en Convocatorias públicas.

(nacionales y/o internacionales)

Título del proyecto:

Entidad financiadora:

Entidades participantes:

Duración, desde:

hasta:

Cuantía de la subvención:

Investigador responsable:

Número de investigadores participantes:

1. Proyectos subvencionados por el MEC

TÍTULO DEL PROYECTO: Estructura y reactividad de complejos de metales de transición:
Interacción metal-ligando y activación molecular

ENTIDAD FINANCIADORA: MECD-DGICYT (PB92-0621)

DURACIÓN DESDE: 1993 HASTA: 1996

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 14.000.000 ptas

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Antonio Oliva

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador
incorporado a partir de septiembre de 1994.

TÍTULO DEL PROYECTO: Acción Integrada Hispano-Francesa (1996: 228 B/95 ; 1997:
0182/96 ; 1998: 236/97)

ENTIDAD FINANCIADORA: MEC

ENTIDADES PARTICIPANTES: UAB, Université de Paris-Sud

DURACIÓN, desde: 1996 hasta: 1998

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN (UAB): 1.615.000 ptas

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Agustín Lledós, Yves Jean

Número de investigadores participantes:

TÍTULO DEL PROYECTO: Acción Integrada Hispano-Francesa (HF2000-0114)

ENTIDAD FINANCIADORA: MCyT

ENTIDADES PARTICIPANTES: UAB, Universidad de París Sur

DURACIÓN, desde: 2001 hasta: 2002

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN (UAB): 1.060.000 ptas

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Agustín Lledós, Yves Jean

Número de investigadores participantes:

TÍTULO DEL PROYECTO: Modelización molecular de sistemas con metales de transición: una
nueva herramienta en Química Inorgánica

ENTIDAD FINANCIADORA: MECD-DGES (PB95-0639-CO2-01)

DURACIÓN DESDE: 1996 HASTA: 1999

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 7.000.000 ptas.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Agustín Lledós

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador

TÍTULO DEL PROYECTO: Modelización Molecular de Sistemas con Metales de Transición: Aplicación a Química Organometálica, Bioinorgánica y de Materiales

ENTIDAD FINANCIADORA: MEC-DGI (PB98-0916-CO2-01)

DURACIÓN DESDE: 1999 HASTA: 2002

CUANTÍA DE LA SUBVECIÓN: 9.500.000 ptas.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Agustín Lledós

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador

TÍTULO DEL PROYECTO: Modelización Molecular de Sistemas con Metales de Transición: Aplicaciones en Química Organometálica y Bioinorgánica, Compuestos de alta Nuclearidad y Catálisis Homogénea

ENTIDAD FINANCIADORA: MCYT-DGI (BQU2002-04110-CO2-02)

DURACIÓN DESDE: 2002 HASTA: 2005

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 111.050,00 €

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Agustín Lledós

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador con responsabilidades de dirección.

TÍTULO DEL PROYECTO: Una visión molecular de la Química organometálica y su aplicación en catálisis

ENTIDAD FINANCIADORA: MEC-DGR (CTQ2005-09000-CO2-01)

DURACIÓN DESDE: 2006 HASTA: 2009

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 77.000,00 €

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Agustín Lledós

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador con responsabilidades de dirección.

TÍTULO DEL PROYECTO: Interpretación Molecular de los Mecanismos de la Catálisis Homogénea

ENTIDAD FINANCIADORA: MEC-DGR (CTQ2008-06866-CO2-01)

DURACIÓN DESDE: 2009 HASTA: 2011

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 154.396,00 €

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Agustín Lledós

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador con responsabilidades de dirección.

TITULO DEL PROYECTO: Red de Catálisis Asimétrica (Red CASI)

ENTIDAD FINANCIADORA: MEC, UIB, Comunidad Autónoma Islas Baleares

DURACION DESDE: 2006 HASTA: 2008

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 15.000,00 €

INVESTIGADOR PRINCIPAL: José Manuel Saa (UIB)

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador con

responsabilidades de dirección.

TITULO DEL PROYECTO: Desarrollo de entidades organometálicas para reacciones de funcionalización selectiva de moléculas orgánicas (Proyecto Consolider Ingenio 2010: CSD2007-00006)

ENTIDAD FINANCIADORA: MEC

DURACION DESDE: 2008

HASTA: 2012

ENTIDADES PARTICIPANTES: Univ. Zaragoza, Univ. Valencia, Univ. Oviedo, UAB, Univ. Santiago, Univ. Castilla-La Mancha, Univ. Sevilla-IIQ, Univ. Complutense Madrid, Univ. Alicante, Univ. York

SUBVENCIÓN: 5.000.000,00 € (total)

INVESTIGADORES PRINCIPALES: M.A. Esteruelas (coordinador), G. Asensio, J. Gimeno, A. Lledós, A. Vallribera, J. L. Mascareñas, A. Otero, M. Paneque, M. A. Sierra, M. Yus, S. Duckett

TITULO DEL PROYECTO: Catalysis in Water: A computational Chemistry Challenge

ENTIDAD FINANCIADORA: MICINN (HH2008-0028)

DURACION DESDE: 2009

HASTA: 2010

ENTIDADES PARTICIPANTES: UAB, Chem. Res. Cent. Budapest

SUBVENCIÓN: 11.590,00 €

INVESTIGADORES PRINCIPALES: G. Ujaque (Esp) – A. Stirling (Hun)

TÍTULO DEL PROYECTO: Descripción a Nivel Atómico de la Catálisis: Moléculas, Superficies y Enzimas.

ENTIDAD FINANCIADORA: MICINN (CTQ2011-23336)

DURACIÓN DESDE: 2012

HASTA: 2014

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 159.000,00 €

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Agustí Lledós

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador con responsabilidades de dirección.

TITULO DEL PROYECTO: RED ORFEO-CINQA "Centro de Innovación en Química Avanzada" (CTQ2014-51912-REDC)

ENTIDAD FINANCIADORA: MICINN

DURACION DESDE: 2014

HASTA: 2016

ENTIDADES PARTICIPANTES: Univ. Zaragoza, Univ. Valencia, Univ. Oviedo, UAB, Univ. Santiago, Univ. Castilla-La Mancha, Univ. Sevilla-IIQ, Univ. Complutense Madrid, Univ. Alicante, Univ. York

SUBVENCIÓN: 41.000,00 €

INVESTIGADORES PRINCIPALES: M.A. Esteruelas (coordinador), G. Asensio, J. Gimeno, A. Lledós, A. Vallribera, J. L. Mascareñas, A. Otero, M. Paneque, M. A. Sierra, M. Yus, S. Duckett

TÍTULO DEL PROYECTO: Hacia el Diseño Computacional de Nuevas Rutas Catalíticas.

ENTIDAD FINANCIADORA: MICINN (CTQ2014-54071-P)
DURACIÓN DESDE: 2015 HASTA: 2017
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 137.940,00 €
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Gregori Ujaque
TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Investigador Principal.

TITULO DEL PROYECTO: RED ORFEO-CINQA "Centro de Innovación en Química Avanzada"
ENTIDAD FINANCIADORA: MICINN (CTQ2016-81797-REDC)
DURACION DESDE: 2017 HASTA: 2018
ENTIDADES PARTICIPANTES: Univ. Zaragoza, Univ. Valencia, Univ. Oviedo, UAB, Univ. Santiago, Univ. Castilla-La Mancha, Univ. Sevilla-IIQ, Univ. Complutense Madrid, Univ. Alicante, Univ. York
SUBVENCIÓN: 41.500,00 €
INVESTIGADORES PRINCIPALES: M.A. Sierra (coordinador), V. Cadierno, G. Ujaque, A. Vallribera, C. Saa, A. Otero, M. Paneque, M. A. Esteruelas, F. Foubelo, S. Duckett.

TITULO DEL PROYECTO: Red de Catálisis Asimétrica (Red CASI)
ENTIDAD FINANCIADORA: MICINN (CTQ2016-81893-REDT)
DURACION DESDE: 2017 HASTA: 2019
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 18.000,00 €
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Claudio Palomo (EHU)
INVESTIGADORES PRINCIPALES: C. Palomo (coordinador), A. Riera, M. Amat, G. Ujaque, P. Melchiorre, J.C. Carretero, J.M. Lassaletta, J.M. Sansano, P. Clapés
TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador con responsabilidades de dirección.

TÍTULO DEL PROYECTO: De la Catálisi Molecular a la Supra-Bio-Catalisis: un enfoque computacional.
ENTIDAD FINANCIADORA: MICINN (CTQ2017-87889-P)
DURACIÓN DESDE: 2018 HASTA: 2020
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 110.110,00 €
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Gregori Ujaque, Jean Didier Maréchal
TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Investigador Principal.

TITULO DEL PROYECTO: COMPLEJOS ORGANOMETALICOS PARA LA GENERACION DE NUEVAS SUSTANCIAS, MATERIALES Y TRANSFORMACIONES
ENTIDAD FINANCIADORA: MCIU (RED2018-102387-T)
DURACION DESDE: 2018 HASTA: 2020
ENTIDADES PARTICIPANTES: Univ. Zaragoza, Univ. Valencia, Univ. Oviedo, UAB, Univ. Santiago, Univ. Castilla-La Mancha, Univ. Sevilla-IIQ, Univ. Complutense Madrid, Univ. Alicante, Univ. York
SUBVENCIÓN: 20.000,00 €
INVESTIGADORES PRINCIPALES: M.A. Sierra (coordinador), V. Cadierno, G. Ujaque, A. Vallribera, C. Saa, A. Otero, M. Paneque, M. A. Esteruelas, F. Foubelo, S. Duckett.

TÍTULO DEL PROYECTO: Fronteras en la modelización de procesos de catalisis y Reconomientos moleculares mediados por metales. (FMM-CatRec)
ENTIDAD FINANCIADORA: MICINN (PID2020-116861GB-I00)
DURACIÓN DESDE: 2021 HASTA: 2024
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 157.300,00 €
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Gregori Ujaque, Jean Didier Maréchal
TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Investigador Principal.

TÍTULO DEL PROYECTO: Retos actuales en la modelización de la catálisis molecular y supramolecular
ENTIDAD FINANCIADORA: MICINN (PID2023-150881NB-I00)
DURACIÓN DESDE: 2024 HASTA: 2027
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 199.835,00 €
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Gregori Ujaque
TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Investigador Principal.

TÍTULO DEL PROYECTO: Materiales Supramoleculares Funcionales
ENTIDAD FINANCIADORA: MICINN (RED2024-153609-T)
DURACIÓN DESDE: 2024 HASTA: 2026
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 20.000,00 €
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Toni Frontera (coordinador), Gregori Ujaque (UAB)
TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: coordinador UAB

1. Proyectos subvencionados por la Generalitat de Catalunya

TÍTULO DEL PROYECTO: “Grup de Síntesi i Modelització de sistemes amb metalls de transició”
ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat de Catalunya (1997SGR 00411)
DURACIÓN DESDE: 1998 HASTA: 1999
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 1.150.000 ptas.
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Agustín Lledós
TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador

TÍTULO DEL PROYECTO: “Grup de Síntesi i Modelització de sistemes amb metalls de transició”
ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat de Catalunya (1999SGR 0089)
DURACIÓN DESDE: 2000 HASTA: 2002
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 2.600.000 ptas.
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Agustín Lledós
TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador

TÍTULO DEL PROYECTO: “Grup de Síntesi i Modelització de sistemes amb metalls de transició”

ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat de Catalunya (2001SGR 00109)

DURACIÓN DESDE: 2001 HASTA: 2004

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 43.873,88 €

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Agustín Lledós

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador

TÍTULO DEL PROYECTO: “Grup de Síntesi i Modelització de sistemes amb metalls de transició”

ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat de Catalunya (2005SGR 00896)

DURACIÓN DESDE: 2005 HASTA: 2008

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 41.200,00 €

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Agustín Lledós

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador

TÍTULO DEL PROYECTO: “Grup de Síntesi i Modelització de sistemes amb metalls de transició”

ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat de Catalunya (2009SGR 68)

DURACIÓN DESDE: 2009 HASTA: 2012

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 43.680,00 €

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Agustín Lledós

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador

TÍTULO DEL PROYECTO: “Xarxa de Referència en Química Teòrica i Computacional de Catalunya” (XRQTC)

ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat de Catalunya

DURACIÓN DESDE: 2007 HASTA: 2010

SUBVENCIÓN: 600.000,00 € (total)

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Francesc Illas (UB)

TÍTULO DEL PROYECTO: “Grup de Síntesi i Modelització de sistemes amb metalls de transició”

ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat de Catalunya (2014SGR 989)

DURACIÓN DESDE: 2014 HASTA: 2016

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 12.000,00 €

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Agustí Lledós

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador

TÍTULO DEL PROYECTO: “Catalysis in Supramolecular Nanoreactors: A Molecular Approach”

ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat de Catalunya (2016 BP 00157)

DURACIÓN DESDE: 2017 HASTA: 2019

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 92.000,00 €

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Gregori Ujaque

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Ayuda postdoctoral del programa Beatriu

de Pinós para contratar al Dr. Jorge Escorihuela.

TÍTULO DEL PROYECTO: “Computational BioNanoCat group”

ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat de Catalunya (2017SGR 1323)

DURACIÓN DESDE: 2017 HASTA: 2019

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 19.000,00 €

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Mariona Sodupe

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador

TÍTULO DEL PROYECTO: “Computational BioNanoCat group”

ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat de Catalunya (2021 SGR 00019)

DURACIÓN DESDE: 2021 HASTA: 2023

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 0,00 €

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Mariona Sodupe

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador

1. Proyectos subvencionados por la Unión Europea

TÍTULO DEL PROYECTO: New Chemistry and Catalysis with Hydride Compounds (HYDROCHEM)”

ENTIDAD FINANCIADORA: Unión Europea (RTN2-2001-00003)
(HYDROCHEM: HPRN-CT-2002-00176)

DURACIÓN DESDE: 2002 HASTA: 2006

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 178.000 euros.

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Agustín Lledós (UAB), R. Poli (coordinador), M. Peruzzini, S. Duckett, E. Drent, A. Albinati, E. Vorontsov.

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador con responsabilidades de dirección.

TÍTULO DEL PROYECTO: Transition Metal Chemistry and Catalysis in Aqueous Media

ENTIDAD FINANCIADORA: Unión Europea (FP6-2002-Mobility-1)
(AQUACHEM; MRTN-CT-2003-503864)

DURACIÓN DESDE: 2004 HASTA: 2008

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 1.898.995,44 €

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Agustín Lledós (UAB), Mauricio Peruzzini (coordinador), F. Joó, O. Lev, J.-P. Majoral, A.J.L. Pombeiro, A. Romerosa, E. Shubina, R. van Eldik.

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador con responsabilidad de dirección.

TÍTULO DEL PROYECTO: Catalytic Routines for Small Molecule Activation (CARISMA)

ENTIDAD FINANCIADORA: Unión Europea (CMST COST Action CM1205)

DURACIÓN DESDE: 2013

HASTA: 2017

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 140.000 € (primer año)

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Martin Albrecht (UC Dublin); Agustí Lledós (UAB)

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador con responsabilidad de dirección.

TÍTULO DEL PROYECTO: “Coordination Chemistry Inspires Molecular Catalysis” (ref: GA number-860322-CCIMC)

ENTIDAD FINANCIADORA: Unión Europea (MSCA Innovative Training Networks (H2020-MSCA-ITN-EJD-2019))

DURACIÓN DESDE: 2020

HASTA: 2024

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 3,977,588.16 € (UAB: 501,809.76)

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rinaldo Poli (Toulouse); Rosa M^a Sebastian (UAB)

TIPO DE PARTICIPACIÓN DEL SOLICITANTE: Miembro del equipo investigador con responsabilidad de dirección.

Publicaciones o Documentos Científico-Técnicos

(CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = "review", E = editor,
S = Documento Científico-Técnico restringido.)

Research ID: K-6406-2014

ORCID: 0000-0001-5896-9998

A= Artículos

1. Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Agustí Lledós "A Theoretical Evaluation of Steric and Electronic Effects on the Structure of $[\text{OsO}_4(\text{NR}_3)](\text{NR}_3 = \text{Bulky Chiral Alkaloid Derivative})$ Complexes".
Theoretica Chimica Acta, **94**, 67-73 (1996).
2. Stefan Dapprich, Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Agustí Lledós, Djamaladdin G. Musaev, Keiji Morokuma "Theory Does Not Support an Osmaoxetane Intermediate in the Osmium-Catalyzed Dihydroxylation of Olefins".
Journal of the American Chemical Society, **118**, 11660-11661 (1996).
3. Guada Barea, Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Agustí Lledós "Basis set influence on the ab initio description of the dihydrogen complex $[\text{Os}(\text{PH}_3)_2\text{Cl}(\text{CO})\text{H}(\text{H}_2)]$ ".
Journal of Molecular Structure (Theochem), **371**, 59-68 (1996).
4. Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Odile Eisenstein "Different van der Waals radii for organic and inorganic halogen atom: a significant improvement in IMOMM performance".
Theoretical Chemistry Accounts, **96**, 146-150 (1997).
5. Núria Duran, Pilar González-Duarte, Agustí Lledós, Teodor Parella, Joan Sola, Gregori Ujaque, William Clegg, Kelly A. Fraser "Theoretical, structural and NMR studies of fluxionality in thiolato-bridged platinum (II)-platinum (IV) dimers".
Inorganica Chimica Acta, **265/1-2**, 89-102 (1997).
6. Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Agustí Lledós "Theoretical Characterization of an Intermediate for the [3+2] Cycloaddition Mechanism in the Bis(dihydroxy-quinidine)-3,6-Pyridazine-Osmium Tetroxide-Catalyzed Dihydroxylation of Styrene".
Journal of Organic Chemistry, **62**, 7892-7894 (1997).
7. Gregori Ujaque, Alan C. Cooper, Feliu Maseras, Odile Eisenstein, Kenneth G. Caulton "Computational Evidence of the Importance of Substituent Bulk on Agostic Interactions in $\text{Ir}(\text{H}_2)(\text{P}^t\text{Bu}_2\text{Ph})_2^+$ ".
Journal of the American Chemical Society, **120**, 361-365 (1998).
8. Gabriel Aullón, Gregori Ujaque, Agustí Lledós, Santiago Álvarez, Pere Alemany "To Bend or not to Bend: the Dilemma of the Edge-sharing Binuclear Square Planar Complexes of d^8 Transition Metal Ion".

Inorganic Chemistry, **37**, 804-813 (1998).

9. Mercè Capdevila, Yolanda Carrasco, William Clegg, Robert Coxall, Pilar González-Duarte, Agustí Lledós, Joan Sola, Gregori Ujaque "The First Stable Cu^{II} complex Containing Four Sulfide Ligands: Synthesis and Structural Characterization of [Pt₂(dppe)₂(μ - S)₂] and [Cu{Pt₂(dppe)₂(μ₃ - S)₂}₂]²⁺".
Journal of Chemical Society. Chemical Communications, **5**, 597-598 (1998).
10. Mercè Capdevila, William Clegg, Robert A. Coxall, Pilar González-Duarte, Mohamed Hamidi, Agustí Lledós, Gregori Ujaque "Palladium (II) with Pd₂S₂ Rings. Synthesis and Theoretical Characterization of [Pd₂(dppe)₂(μ-S)₂] and X-ray Characterization of [Pd₃(dppe)₃(μ₃-S)₂]Cl₂".
Inorganic Chemistry Communications, **12**, 466-468, (1998).
11. Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Odile Eisenstein, Louise Liable-Sands, Arnold L. Rheingold, Wenbin Yao, Robert H. Crabtree "Breaking an Electronically Preferred Symmetry by Steric Effects in a Series of [Ir(biph)-(Hal)-(QR₃)₂] Compounds".
New Journal of Chemistry, **12**, 1493-1498 (1998).
12. Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Agustí Lledós "Theoretical Study on the Origin of Enantioselectivity in the Bis(dihydroquinidine)-3,6-Pyridazine·Osmium Tetroxide-Catalyzed Dihydroxylation of Styrene".
Journal of the American Chemical Society, **121**, 1317-1323 (1999).
13. Gabriel Aullón, Gregori Ujaque, Agustí Lledós, Santiago Álvarez "Edge-sharing Binuclear d8 Complexes with XR Bridges: Theoretical and Structural Database Study of their Molecular Conformation".
Chemistry-A European Journal, **5**, 1390-1410 (1999).
14. Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Agustí Lledós, Leopoldo Contreras, Antonio Pizzano, Dieter Rodewald, Luis Sánchez, Ernesto Carmona, Angeles Monge, Caridad Ruiz "Theoretical and Syntethic Studies on Dihaptoacyl and β-Agostic Acyl Complexes of Molybdenum".
Organometallics, **18**, 3294-3305 (1999).
15. Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Agustí Lledós "A Comparative Study of DFT and Traditional ab initio Methodologies on the OsO₄ Molecule".
International Journal of Quantum Chemistry, **77**, 544-551 (2000).
16. Gregori Ujaque, Patrick S. Lee, K.N. Houk, Martin F. Hentemann, Samuel J. Danishefsky "The Origin of *Endo* Stereoselectivity in the Hetero-Diels-Alder Reactions of Aldehydes with *ortho*-Xylylenes: CH-π, π-π and Steric Effects on Stereoselectivity".
Chemistry- A European Journal, **8**, 3423-3430 (2002).
17. Gregori Ujaque, Joseph E. Norton, K.N. Houk "Electrostatic Interactions Between Substituents as Regioselectivity Controlled Elements in Diels-Alder Cycloadditions. A DFT Study of Cycloadditions of 1-Methoxy-4-trimethylsiloxy Dienes with Acrylonitrile." *Journal of Organic Chemistry*, **67**, 7169-7184 (2002).

18. Gregori Ujaque, Dean J. Tantillo, K.N. Houk, Kinya Hotta, Donald Hilvert "Catalysis on the Coastline: Theozyme, Molecular Dynamics and Free Energy Perturbation Analysis of Antibody 21D8 Catalysis of the Decarboxylation of 5-Nitro-3-Carboxybenzoxazole." *Journal of Computational Chemistry*, **24**, 98-110 (2003).
19. Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Agustí Lledós "Diradical vs. Concerted Mechanisms for the Dihydroxylation of Protoanemonine by OsO₄ and OsO₄-NH₃. The Effect of the Base in the Reaction", *European Journal of Organic Chemistry*, 833-839 (2003).
20. David Balcells, Galí Drudis-Solé, Maria Besora, Nicole Dölker, Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Agustí Lledós "Some Critical Issues in the Application of Quantum Mechanics / Molecular Mechanics Methods to the Study of Transition Metal Complexes". *Faraday Discussions*, **124**, 429-441 (2003).
21. Miguel A. Esteruelas, Agustí Lledós, Montserrat Oliván, Enrique Oñate, María A. Tajada, Gregori Ujaque, "Ortho-CH Activation of Aromatic Ketones, Partially Fluorinated Aromatic Ketones and Aromatic Imines by a Trihydride-Stannyl-Osmium(IV) Complex". *Organometallics*, **22**, 3753-3765 (2003).
22. Rubén Mas-Ballesté, Paul A. Champkin, William Clegg, Pilar González-Duarte, Agustí Lledós and Gregori Ujaque, "Unusual C–H allylic activation in the {PtII(cod)} fragment bonded to a {Pt2(μ -S)2} core" *Organometallics*, **23**, 2522-2532 (2004).
23. Margarita Paneque, Manuel L. Poveda, Laura L. Santos, Ernesto Carmona, Agustí Lledós, Gregori Ujaque, Kurt Mereiter, "A Measureable Equilibrium Between Iridium Hydride-Alkene and -Alkylidene Isomers" *Angewandte Chemie, Int. Ed. Engl.*, **43**, 3708-3711 (2004).
24. Gregori Ujaque and Feliu Maseras "Applications of Hybrid DFT/Molecular Mechanics to Homogeneous Catalysis" *Structure and Bonding*, **112**, 117-150 (2004).
25. Galí Drudis-Solé, Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Agustí Lledós, "A Computational Study on the Acceleration of the Prins Reaction by indium Chloride" *Comptes rendus Chimie, Académie des Sciences*, **7**, 885-893 (2004).
26. Galí Drudis-Solé, Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Agustí Lledós, "A QM/MM Study on the Asymmetric Dihydroxylation of Terminal Aliphatic n-Alkenes by OsO₄·(DHQD)₂PYDZ. Enantioselectivity as a Function of the Chain Length" *Chemistry – A European Journal*, **11**, 1017-1029 (2005).
27. Galí Drudis-Solé, Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Agustí Lledós "Enantioselectivity in the Olefin Dihydroxylation of Olefins" *Topics in Organometallic Chemistry*, **12**, 79-107 (2005).

28. David Balcells, Feliu Maseras, Gregori Ujaque, "A computational rationalization of the dependence of the enantioselectivity on the nature of the catalyst in the vanadium-catalyzed oxidation of sulides by hydrogen peroxide"
Journal of the American Chemical Society, 127, 3624-3634 (2005).
29. Ataulpa A. C. Braga, Nelson H. Morgon, Gregori Ujaque, Feliu Maseras, "Computational Characterization of the Role of the Base in the Suzuki-Miyaura Cross-Coupling Reaction"
Journal of the American Chemical Society, 127, 9298-9307 (2005)
30. José Giner Planas, Clara Viñas, Francesc Teixidor, Aleix Comas-Vives, Gregori Ujaque, Agustí Lledós, Mark E. Light, Michael B. Hursthouse "Self-assembly of Mercaptane Metallacarborane Complexes by an Unconventional Cooperative Effect: A C-H $\cdots$ S-H $\cdots$ H-B Hydrogen/Dihydrogen Bond Interaction"
Journal of the American Chemical Society, 127, 15976-15982 (2005).
31. Gabor Kovacs, Gregori Ujaque, Agustí Lledós, Ferenc Joó "Theoretical investigation of the selective C=C hydrogenation of unsaturated aldehydes by [$\{\text{RuCl}_2(\text{mtppps})_2\}_2$] in acidic media"
Organometallics, 25, 862-872 (2006).
32. Mónica Viciano, Macarena Poyatos, Mercedes Sanaú, Eduardo Peris, Andrea Rossin, Gregori Ujaque, Agustí Lledós
"C-H Oxidative Addition of Bisimidazolium Salts to Ir and Rh Complexes, and N-Heterocyclic Carbene Generation. A Combined Experimental and Theoretical Study"
Organometallics, 25, 1120-1134 (2006).
33. Ana C. Albéniz, Pablo Espinet, Alberto Pérez-Mateo, Ainara Nova and Gregori Ujaque
"Formation of a Vinyliminium Palladium Complex by C-C Coupling in Vinylcarbene Palladium Aryl Complexes"
Organometallics, 25, 1293-1297 (2006).
34. Oleg A. Filippov, Andrey M. Filin, Natalia V. Belkova, Agustí Lledós, Gregori Ujaque, Lina M. Epstein, Elena S. Shubina "Proton Transfer and H₂ Elimination Reaction of Main Group Hydrides EH₄⁻ (E = B, Al, Ga) with Alcohols"
Inorganic Chemistry, 45, 3086-3096 (2006).
35. Aleix Comas-Vives, C. González-Arellano, A. Corma, M. Iglesias, F. Sánchez, G. Ujaque, "Single Site Homogeneous and heterogeneized Gold(III) hydrogenation Catalysts: Mechanistic Implications"
Journal of the American Chemical Society, 128, 4756-4765 (2006).
36. Ainara Nova, Pilar González-Duarte, Agustí Lledós, Ruben Mas-Ballesté, Gregori Ujaque, "Aliphatic C-X (X = halogen) bond activation by transition metal complexes containing the {Pt₂S₂} core: a theoretical study of the reaction mechanism"
Inorganica Chimica Acta, 359, 3736-3744 (2006).

37. Ataualpa A. C. Braga, Gregori Ujaque, Feliu Maseras "A DFT study of the full catalytic cycle of the Suzuki-Miyaura cross-coupling on a model system"
Organometallics, 25, 3647-3658 (2006).
38. David Balcells, Gregori Ujaque, Inmaculada Fernandez, Noureddine Khiar and Feliu Maseras "Mechanism of the Base-Assisted Displacement of Chloride by Alcohol in Sulfinyl Derivatives"
Journal of Organic Chemistry, 71, 6388-6396 (2006).
39. Hugo R. R. Santos, Gregori Ujaque, Maria J. Ramos, José A. N. F. Gomes "QM/QM Study of the Coverage Effects on the Adsorption of Amino-cyclopentene at the Si(100) Surface"
Journal of Computational Chemistry, 27, 1892-1897 (2006).
40. Andrea Rossin, Gábor Kovács, Gregori Ujaque, Agustí Lledós, Ferenc Joó "The active role of the water solvent in the regioselective C=O hydrogenation of unsaturated aldehydes by $[\text{RuH}_2(\text{mtpms})_x]$ in basic media"
Organometallics, 25, 5010-5023 (2006).
41. Ataualpa A. C. Braga, Nelson H. Morgon, Gregori Ujaque, Agustí Lledós, Feliu Maseras, "Computational study of the transmetalation process in the Suzuki-Miyaura cross-coupling of aryls"
Journal of Organometallic Chemistry, 691, 4459-4466 (2006).
42. Ainara Nova, Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Agustí Lledós, Pablo Espinet "A Critical Analysis of the Cyclic and Open Alternatives of the Transmetalation Step in the Stille Cross-Coupling Reaction"
Journal of the American Chemical Society, 128, 14571-14578 (2006).
43. Josep Puigmartí-Luis, Andrea Minoia, Ángel Pérez del Pino, Gregori Ujaque, Concepció Rovira, Agustí Lledós, Roberto Lazzaroni and David B. Amabilino, "Chemical and Constitutional Influences in the Self-Assembly of Functional Supramolecular Hydrogen-bonded Nanoscopic Fibers"
Chemistry – A European Journal, 12, 9161-9175 (2006).
44. Hugo R.R. Santos, Gregori Ujaque, Maria J. Ramos, José A.N.F. Gomes "Effect of the tert-Butoxycarbonyl Protecting Group on the Adsorption of Protected Amino-Cyclopentene on the Si(100) Surface"
Physical Review B, 75, 125413-5 (2007).
45. Joo-Eun Jee, Aleix Comas-Vives, Chiara Dinoi, Gregori Ujaque, Rudi van Eldik, Agustí Lledós, Rinaldo Poli "Nature of $\text{Cp}^*\text{MoO}_2^+$ in water and intramolecular proton transfer mechanism by stopped-flow kinetics and DFT calculations"
Inorganic Chemistry, 46, 4103-4113 (2007).
46. Gábor Kovács, Gregori Ujaque, Agustí Lledós, Ferenc Joó "The role of water in the stereoselective hydrogenation of 1,2-diphenylacetylene catalyzed by the water soluble $[\{\text{RuCl}_2(\text{mtpms})_2\}_2]$. A theoretical study."

European Journal of Inorganic Chemistry, 2879-2889 (2007).

47. Aleix Comas-Vives, Gregori Ujaque, Agustí Lledós “Hydrogen Transfer to Ketones Catalyzed by the Shvo's Ruthenium Hydride Complex: A Mechanistic Insight”
Organometallics, 26, 4135-4144 (2007).
48. David Balcells, Gregori Ujaque, Inmaculada Fernandez, Nouredine Khier and Feliu Maseras “How does the achiral base decide the stereochemical outcome in the dynamic kinetic resolution of sulfinyl chlorides? A computational study.
Advanced Synthesis & Catalysis, 349, 2103 – 2110 (2007).
49. Joseph M. Hayes, Mónica Viciano, Eduardo Peris, Gregori Ujaque, Agustí Lledós “Mechanism of Formation of Silver N-Heterocyclic Carbenes using Silver Oxide: A Theoretical Study”
Organometallics, 26, 6170-6183 (2007).
50. Gabor Kovács, Gregori Ujaque, Agustí Lledós “The Reaction Mechanism of the Hydroamination of Alkenes Catalyzed by Gold(I)-Phosphine: The Role of the Counterion and the N-Nucleophile Substituents in the Proton-transfer Step”
Journal of the American Chemical Society, 130, 853-864 (2008).
51. Aleix Comas-Vives, C. González-Arellano, M. Boronat, A. Corma, M. Iglesias, F. Sánchez, and Gregori Ujaque “Mechanistic analogies and differences between Gold and Palladium supported Salen hydrogenation catalysts: a combined kinetic and DFT study”
Journal of Catalysis, 254, 226-237 (2008).
52. Ainara Nova, Gregori Ujaque, Ana C. Albéniz, Pablo Espinet “Mechanism of the Rhodium-catalyzed Asymmetric Isomerization of Allylamines to Enamines”
Chemistry A European Journal, 14, 3323-3329 (2008).
53. Ainara Nova, Rubén Mas-Ballesté, Gregori Ujaque, Pilar González-Duarte and Agustí Lledós “C_{sp3}–F bond activation by nucleophilic attack of the {Pt₂S₂} core assisted by non-covalent interactions”
Chemical Communications, 3130-3132 (2008).
54. M. Isabel Burguete, Jorge Escorihuela, Santiago V. Luis, Agustí Lledós, Gregori Ujaque “New Chiral Tetraaza Ligands for the Efficient Asymmetric Addition of Dialkylzinc to Aromatic Aldehydes”
Tetrahedron Letters, 64, 9717-9724 (2008).
55. Salvador Moncho, Gregori Ujaque, Agustí Lledós, Pablo Espinet “When Are tricoordinated Palladium(II) Species Accessible? Stability, Trends and Mechanistic Consequences”
Chemistry a European Journal, 14, 8986-8994 (2008).

56. Aleix Comas-Vives, Gregori Ujaque, Agustí Lledós "A Theoretical Analysis of the Hydrogen-Transfer Reaction to C=N, C=C and C≡C Bonds Catalyzed by Shvo's Ruthenium Complex"
Organometallics, 27, 4854-4863 (2008).
57. Aleix Comas-Vives, Gregori Ujaque, Agustí Lledós "Metal-Catalyzed Hydrogen-Transfer Processes: Inner- or Outer-Sphere Process? The Shvo Catalyst as Example of Computational Unravelling"
Journal of Molecular Structure – Theochem, 903, 123-132 (2009).
58. Salvador Moncho, Gregori Ujaque, Pablo Espinet, Feliu Maseras, Agustí Lledós "The Role of Amide Ligands in the Stabilization of Pd(II) Tricoordinated Complexes. Is the Pd—NR₂ Bond Order Single or Higher?"
Theoretical Chemistry Accounts 126, 75-84 (2009).
59. Beatriz Trillo, Fernando López, Sergi Montserrat, Gregori Ujaque, Luis Castedo, Agustí Lledós, and Jose L. Mascareñas "Gold-Catalyzed [4C+3C] Intramolecular Cycloaddition of Allenedienes. Uncovering of an Alternative, Ligand-Dependent [4 + 2] vs [4 + 3] Pathway"
Chemistry, A European Journal, 15, 3336-3339 (2009).
60. Martín Pérez-Rodríguez, Ataulpa A. C. Braga, Max Garcia-Melchor, Mónica H. Pérez-Temprano, Juan A. Casares, Gregori Ujaque, Angel R. de Lera, Rosana Álvarez, Feliu Maseras, and Pablo Espinet "C-C Reductive Elimination in Palladium Complexes, and the Role of Coupling Additives. A DFT Study Supported by Experiment"
Journal of the American Chemical Society, 131, 3650-3657 (2009).
61. Christophe Gourlaouen, Gregori Ujaque, Agustí Lledós, Mercedes Medio-Simon, Gregorio Asensio, Feliu Maseras, "Why is the Suzuki-Miyaura cross-coupling of sp³ carbons in α-bromosulfoxide systems fast and stereoselective? A DFT study on the mechanism"
Journal of Organic Chemistry, 74, 4049-4054 (2009).
62. Ainara Nova, Rubén Mas-Ballesté, Gregori Ujaque, Pilar González-Duarte, and Agustí Lledós "Aromatic C-F Activation by Complexes Containing the {Pt₂S₂} Core via Nucleophilic Substitution: A Combined Experimental and Theoretical Study"
Dalton Transactions, 30, 5980-5988 (2009).
63. Patricia Lara, Margarita Paneque, Manuel L. Poveda, Laura L. Santos, José E. V. Valpuesta, Ernesto Carmona, Salvador Moncho, Gregori Ujaque, Agustí Lledós, Eleuterio Álvarez, Kurt Mereiter "Experimental and Computational Studies on the Iridium Activation of Aliphatic and Aromatic C—H Bonds of Alkyl Aryl Ethers and Related Molecules"
Chemistry, A European Journal, 30, 3034-9045 (2009).
64. Patricia Lara, Margarita Paneque, Manuel L. Poveda, Laura L. Santos, José E. V. Valpuesta, Verónica Salazar, Ernesto Carmona, Salvador Moncho, Gregori Ujaque, Agustí Lledós, Celia Maya, Kurt Mereiter "Synthetic, Mechanistic and Theoretical

Studies on the Generation of Iridium Hydride Alkylidene and Iridium Hydride Alkene Isomers”

Chemistry, A European Journal, 30, 3046-9057 (2009).

65. Isaac Alonso, Beatriz Trillo, Fernando López, Sergi Montserrat, Gregori Ujaque, Luis Castedo, Agustí Lledós, and Jose L. Mascareñas “Gold-Catalyzed [4C + 2C] Cycloadditions of Allenedienes, including an Enantioselective Version with New Phosphoroamidite-Based Catalyst: Mechanistic Aspects of the Divergence between [4C+3C] and [4C+2C] Pathways”

Journal of the American Chemical Society, 131, 13020-13030 (2009).

66. Ana B. Cuenca, Sergi Montserrat, Kabir M. Hossain, Gisela Mancha, Agustí Lledós, Mercedes Medio-Simón, Gregori Ujaque, Gregorio Asensio “Gold(I)-Catalyzed Intermolecular Oxyarylation of Alkynes: Unexpected Regiochemistry in the Alkylation of Arenes”

Organic Letters, 11, 4906-4909 (2009).

67. Beatriz Fuentes, Max García-Melchor, Juan Casares, Gregori Ujaque, Agustí Lledós, Feliu Maseras, and Pablo Espinet “Palladium Round-Trip during the Negishi Coupling of trans-[PdMeCl(PMePh₂)₂] with ZnMeCl. Detection of two Intermediates and DFT Study of the Transmetalation Step”

Chemistry – A European Journal, 16, 8596-8599 (2010).

68. Aleix Comas-Vives, András Stirling, Agustí Lledós and Gregori Ujaque “The Wacker Process: Inner- or Outer-Sphere Nucleophilic Addition? First Principles Molecular Dynamics Answers”

Chemistry – A European Journal, 16, 8738-8747 (2010).

69. Manuel Jiménez-Tenorio, M. Carmen Puerta, Pedro Valerga, Salvador Moncho, Gregori Ujaque and Agustí Lledós “Proton Transfer Reactions to Half-Sandwich Ruthenium Trihydride Complexes bearing Hemilabile P,N Ligands: Experimental and DFT Studies”

Inorganic Chemistry, 49, 6035-6057 (2010).

70. Gábor Kovács, Gregori Ujaque, Agustí Lledós “Reaction Mechanism of the Gold(I)-Catalyzed Addition of Phenols to Olefins: A Concerted Process Accelerated by Phenol and Water”

Organometallics, 29, 3252-3260 (2010).

71. Aleix Comas-Vives, Gregori Ujaque and Agustí Lledós “Inner- and Outer-Sphere Hydrogenation Mechanisms: A Computational Perspective”

Advances in Inorganic Chemistry, 62, 231-260 (2010).

72. Gábor Kovács, Agustí Lledós, Gregori Ujaque “Mechanistic Comparison of Acid- and Gold(I)-Catalyzed Nucleophilic Addition Reactions to Olefins”

Organometallics, 29, 5919-5926 (2010).

73. Maria Besora, Ataulpa A.C. Braga, Gregori Ujaque, Feliu Maseras, Agustí Lledós “The Importance of Conformational Search: A Test Case on the Catalytic Cycle of the Suzuki-Miyaura Cross-Coupling”

Theoretical Chemistry Accounts, 128, 639-646 (2011).

74. Sergi Montserrat, Gregori Ujaque, Fernando López, Jose L. Mascareñas and Agustí Lledós “Gold-catalyzed cycloadditions involving allenes: Mechanistic insights from theoretical studies”
Topics in Current Chemistry, 302, 225-248 (2011).
75. Pietro Vidossich, Manuel Á. Ortuño, Gregori Ujaque, and Agustí Lledós “Do Metal···Water Hydrogen Bonds Hold in Solution? Insight from ab initio Molecular Dynamics Simulations”
ChemPhysChem, 12, 1666-1668 (2011).
76. Vinay K. Singh, Emilio Bustelo, Isaac de los Ríos, Ignacio Macías-Arce, M. Carmen Puerta, Pedro Valerga, Manuel Ángel Ortuño, Gregori Ujaque, and Agustí Lledós “Internal Alkyne Isomerization to Vinylidene versus stable π -Alkyne. A Theoretical and Experimental Study on the Divergence of Analogous Cp^*Ru and TpRu systems.
Organometallics, 30, 4014-4031 (2011).
77. Max García-Melchor, Beatriz Fuentes, Agustí Lledós, Juan A. Casares, Gregori Ujaque and Pablo Espinet “Cationic intermediates in the Pd-Catalyzed Negishi Coupling. Kinetic and DFT Study of Alternative Transmetalation pathways in the Me–Me Coupling of ZnMe_2 and $\text{trans-[PdMeCl(PMePh}_2)_2]$ ”
Journal of the American Chemical Society, 133, 13519-13526 (2011).
78. Sergi Montserrat, Isaac Alonso, Fernando López, José L. Mascareñas, Agustí Lledós, Gregori Ujaque “Theoretical study on intramolecular allene-diene cycloadditions catalyzed by PtCl_2 and Au(I) complexes”
Dalton Transactions, 40, 11095-11105 (2011).
79. Gábor Kovács, Agustí Lledós, Gregori Ujaque “Hydroamination of Alkynes with Ammonia: Unforeseen Role of the Gold(I) Catalyst”
Angewandte Chemie, Int. Ed. En., 50, 11147-11151 (2011).
80. Xavier Giner, Carmen Nájera, Gábor Kovács, Agustí Lledós, and Gregori Ujaque “Gold versus Silver-catalyzed Intermolecular Hydroaminations of Alkenes and Dienes”
Advanced Synthesis & Catalysis, 353, 11147-11151 (2011).
81. Max García-Melchor, Maria C. Pacheco, Carmen Nájera, Agustí Lledós, Gregori Ujaque “Mechanistic Exploration of the Pd-Catalyzed Copper-Free Sonogashira Reaction”
ACS Catalysis, 2, 135-144 (2012).
82. Pietro Vidossich, Gregori Ujaque, Agustí Lledós “Pt(II) as proton shuttle during C – H bond activation in the Shilov process”
Chemical Communications, 48, 1979-1981 (2012).
83. Óscar Pablo, David Guijarro, Gábor Kovács, Agustí Lledós, Gregori Ujaque, Miguel Yus “A versatile Ru catalyst for the asymmetric transfer hydrogenation of both aromatic and aliphatic sulfinylimines”
Chemistry, A European Journal, 18, 1969-1983 (2012).

84. Gábor Kovács, András Stirling, Agustí Lledós and Gregori Ujaque “The Nature of $[\text{PdCl}_2(\text{C}_2\text{H}_4)(\text{H}_2\text{O})]$ as Active Species in the Wacker Process. New Insights from Ab Initio Molecular Dynamics Simulations”
Chemistry – A European Journal, 18, 5612 – 5619 (2012).
85. Luca Bellarosa, Josefina Díez, José Gimeno, Agustí Lledós, Francisco J. Suárez, Gregori Ujaque, Cristian Vicent “Highly Efficient Redox Isomerisation of Allylic Alcohols Catalysed by Pyrazole-Based Ruthenium(IV) Complexes in Water: Mechanisms of Bifunctional Catalysis in Water”
Chemistry – A European Journal, 18, 7749 – 7765 (2012).
86. Antonio Antiñolo, Khédidja Dorani, Santiago García-Yuste, Isabel López-Solera, Antonio Otero, María Teresa Tercero-Morales, Gábor Kovács, Gregori Ujaque, Agustí Lledós “Experimental and Theoretical Studies of the Hydrogenation of $\alpha\beta$ -Unsaturated Acids by an 18e- Hydridecarbonylniobocene Complex”
Organometallics, 31, 5177–5184 (2012).
87. Jacob Fernández-Gallardo, Luca Bellarosa, Gregori Ujaque, Agustí Lledós, María José Ruiz, Rosa Fandos and Antonio Otero “Rearrangement of Tridentate [OSO]-Type Ligands and Migratory Insertion Reaction Mechanisms in Cyclopentadienyl Tantalum Complexes”
Organometallics, 31, 7052-7062 (2012).
88. Aleix Comas-Vives, Gregori Ujaque “Unravelling the Pathway of Gold(I)-Catalyzed Olefin Hydrogenation: An Ionic Mechanism”
Journal of the American Chemical Society, 135, 1295-1305 (2013).
89. Manuel Jiménez-Tenorio, M. Carmen Puerta, Pedro Valerga, Manuel A. Ortuño, Gregori Ujaque and Agustí Lledós “Counteranion and Solvent Assistance in Ruthenium-mediated Alkyne to Vinylidene Isomerizations”
Inorganic Chemistry, 52, 8919-8932 (2013).
90. Alvaro Gordillo, Manuel A. Ortuño, Carmen López-Mardomingo, Agustí Lledós, Gregori Ujaque, Ernesto de Jesús “Mechanistic Studies on the Pd-catalyzed Vinylation of Aryl Halides with Vinylalkoxysilanes in Water: the Effect of the Solvent and NaOH Promoter”
Journal of the American Chemical Society, 135, 15749-15763 (2013).
91. Sergi Montserrat, Hélio Faustino, Agustí Lledós, Jose L. Mascareñas Fernando López, and Gregori Ujaque “Mechanistic Intricacies of Gold-catalyzed Intermolecular Cycloadditions between Allenamides and Dienes”
Chemistry – A European Journal, 19, 15248-15260 (2013).
92. Manuel A. Ortuño, Pietro Vidossich, Gregori Ujaque, Salvador Conejero and Agustí Lledós “Solution Dynamics of Agostic Interactions in T-Shaped Pt(II) Complexes from Ab Initio Molecular Dynamics Simulations”
Dalton Transactions, 42, 12165-12172 (2013).

93. Max García-Melchor, Atualpa A.C. Braga, Agustí Lledós, Gregori Ujaque, Feliu Maseras "Computational Perspective on Pd-Catalyzed C–C Cross-Coupling Reaction Mechanisms"
Accounts of Chemical Research, 46 (11), 2626–2634 (2013).
94. Pietro Vidossich, Gregori Ujaque, Agustí Lledós "Palladium monophosphine Pd(PPh₃): is it really accessible in solution?"
Chemical Communications, 50 (6), 661–663 (2014).
95. Andras Stirling, Nisanth N. Nair, Agustí Lledós, Gregori Ujaque "Challenges in Modelling Homogeneous Catalysis: New Answers from Ab Initio Molecular Dynamics to the Controversy over the Wacker Process"
Chemical Society Reviews, 43, 4940–4952 (2014).
96. Manuel Jiménez-Tenorio, M. Carmen Puerta, Pedro Valerga, Manuel A. Ortuño, Gregori Ujaque and Agustí Lledós "Counteranion Dependent Reaction Pathways in the Protonation of Cationic Ruthenium-Vinylidene Complexes"
Organometallics, 33, 2549–2560 (2014).
97. Manuel Ortuño, Agustí Lledós, Feliu Maseras, Gregori Ujaque, "The Transmetalation Process in Suzuki-Miyaura Reactions Revisited: The Role of the Base and the Phosphine Ligands"
ChemCatChem, 6, 3132–3138 (2014).
98. Hugo Valdés, Macarena Poyatos, Gregori Ujaque and Eduardo Peris "Experimental and theoretical approaches to the influence of the addition of pyrene to a series of Pd and Ni NHC-based complexes. Catalytic consequences"
Chemistry A European Journal, 21, 1578–1588 (2015).
99. Almudena Couce-Rios, Gábor Kovács, Gregori Ujaque and Agustí Lledós "Hydroamination of C-C Multiple Bonds with Hydrazine Catalyzed by N—Heterocyclic Carbene-Gold(I) Complexes: Substrate and Ligand Effects"
ACS Catalysis, 5, 815–829 (2015).
100. Sheila Ruiz-Botella, Pietro Vidossich, Gregori Ujaque, Cristian Vicent, Eduardo Peris "A resorcinarene-tetraferrocenyl-based cavitand as redox-switchable host of ammonium salts"
Chemistry A European Journal, 21, 1578–1588 (2015).
101. Joseph M. Hayes, Eric Deydier, Gregori Ujaque, Agustí Lledós, Raluca Malacea, Eric Manoury, Sandrine Vincendeau, Rinaldo Poli "Possible Role of the Strong Base in Ketone Hydrogenation Catalyzed by "non N-H" Complexes"
ACS Catalysis, 5, 4398–4376 (2015).
102. Almudena Couce-Rios, Agustí Lledós, Gregori Ujaque "The Origin of anti-Markovnikov Regioselectivity in Alkene Hydroamination Reactions Catalyzed by [Rh(DPEphos)]⁺

Chemistry A European Journal, 22, 9311-9320 (2016).

103. Pietro Vidossich, Agustí Lledós, Gregori Ujaque “First Principles Molecular Dynamics Studies of Organometallic Complexes and Homogeneous Catalytic Processes” *Accounts of Chemical Research*. 49, 1271-1278 (2016).
104. Pietro Vidossich, Agustí Lledós, Gregori Ujaque " Realistic Simulation of Organometallic Reactivity in Solution by Means of First Principles Molecular Dynamics " *Structure and Bonding*, 167, 81-106 (2016).
105. Sheila Ruiz-Botella, Pietro Vidossich, Gregori Ujaque, Eduardo Peris “A unique tetrabenzoimidazolium-resorcinarene cavitand displaying three distinct anion-selective binding regions” *Chemistry A European Journal*, 22, 15800-15806 (2016).
106. Susana Izquierdo, Stéphanie Essafi, Iker del Rosal, Pietro Vidossich, Roser Pleixats, Adelina Vallribera, Gregori Ujaque, Agustí Lledós, Alexandr Shafir “Acid activation in phenyliodine dicarboxylates: direct observation, structures and implications” *Journal of the American Chemical Society*, 138, 12747-12750 (2016).
107. Jorge Escorihuela, M. Isabel Burguete, Gregori Ujaque, Agustí Lledós and Santiago V. Luis “Mechanistic implications of the enantioselective addition of alkylzinc reagents to aldehydes catalyzed by nickel complexes with α -amino amide ligands” *Organic & Biomolecular Chemistry*, 14, 11125-11136 (2016).
108. Sheila Ruiz-Botella, Pietro Vidossich, Gregori Ujaque, Eduardo Peris, Paul Beer “Tripodal halogen bonding iodo-azolium receptors for anion recognition” *RSC Advances*, 7, 11253-11258 (2017).
109. Maria Besora, Pietro Vidossich, Agustí Lledós, Gregori Ujaque, and Feliu Maseras “On the calculation of reaction free energies in solution: a comparison of current approaches” *Journal of Physical Chemistry*, 122, 1392-1399 (2018).
110. Clément Lepori, Pablo Gómez-Orellana, Allissa Ouharzoune, Régis Guillot, Agustí Lledós, Gregori Ujaque and Jérôme Hannedouche “Well-Defined β -Diketiminatocobalt(II) Complexes For Alkene Cy-clohydroamination of Primary Amines” *ACS Catalysis*, 8, 4446-4451 (2018).
111. Albert Cabré, Giuseppe Sciortino, Gregori Ujaque, Xavier Verdaguer, Agustí Lledós, Antoni Riera “Iridium-Catalyzed Isomerization of N-Sulfonyl Aziridines to Allyl Amines” *Organic Letters*, 20, 5747-5751 (2018).
112. Sara Muñoz-López, Almudena Couce-Rios, Giuseppe Sciortino, Agustí Lledós, Gregori Ujaque “Mechanistic Insights on the Hydration of Terminal and Internal Allenes Catalyzed by $[(\text{NHC})\text{Au}]^+$ ” *Organometallics*, 37, 3543-3551 (2018).

113. Ernest Salomo, Albert Gallen, Giuseppe Sciortino, Gregori Ujaque, Arnald Grabulosa, Agustí Lledós, Antoni Riera, Xavier Verdaguer "Direct Asymmetric Hydrogenation of N-Methyl and N-Alkyl Imines with an Ir(III)H Catalyst"
Journal of the American Chemical Society, 140, 16967-16970 (2018).
114. Jaime Rodríguez-Guerra Pedregal, Ignacio Funes-Ardoiz, Giuseppe Sciortino, José-Emilio Sánchez-Aparicio, Gregori Ujaque, Agustí Lledós, Jean-Didier Maréchal and Feliu Maseras "GARLEEK: Adding an Extra Flavor to ONIOM"
Journal of Computational Chemistry, 40, 381-386 (2019).
115. Almudena Couce-Rios, Agustí Lledós, Israel Fernández, Gregori Ujaque "Origin of the anti-Markovnikov hydroamination of alkenes catalyzed by L-Au(I) complexes: coordination mode determines regioselectivity"
ACS Catalysis, 9, 848-858 (2019).
116. Albert Cabré, Juanjo Cabezas-Giménez, Giuseppe Sciortino, Gregori Ujaque, Xavier Verdaguer, Agustí Lledós and Antoni Riera "Mild Iridium-Catalysed Isomerization of Epoxides. Computational Insights and Application to the Synthesis of beta-Alkyl Amines"
Advanced Synthesis & Catalysis, 361, 3624-3631 (2019).
117. Gantulga Norjmaa, Jean-Didier Maréchal and Gregori Ujaque "Microsolvation and Encapsulation Effects on Supramolecular Catalysis: C-C Reductive Elimination inside [Ga₄L₆]¹²⁻ Metallocage"
Journal of the American Chemical Society, 141, 13114-13123 (2019).
118. Lei Gan, Pol Gimeno, Mark E. Light, Gantulga Norjmaa, Gregori Ujaque, Duane Choquesillo-Lazarte, Julio Fraile, Francesc Teixidor, Clara Viñas, and José Giner Planas "A Reversible Phase Transition of 2D Coordination Layers by B-H...Cu(II) Interactions in a Coordination Polymer"
Molecules 24(17), 3204 (2019).
119. Sheila Ruiz-Botella, Pietro Vidossich, Gregori Ujaque and Eduardo Peris "A resorcinarene-based tetrabenzimidazolylidene complex of rhodium"
Dalton Transactions, 49, 3181-3186 (2020).
120. Albert Cabré, Sergi Rafael, Giuseppe Sciortino, Gregori Ujaque, Xavier Verdaguer, Agustí Lledós and Antoni Riera "Catalytic Regioselective Isomerization of 2,2-Disubstituted Oxetanes to Homoallylic Alcohols"
Angewandte Chemie, Int. Ed. 49, 3181-3186 (2020).
121. Gantulga Norjmaa, Jean Didier Maréchal, Gregori Ujaque "Reaction Rate Inside the Cavity of [Ga₄L₆]¹²⁻ Supramolecular Metallocage is Regulated by the Encapsulated Solvent"
Chemistry A European Journal, 26, 6988-6992 (2020).
122. Ronald Nelson, Martín Calvelo, Rebeca García-Fandiño, Agustí Lledós, Gregori Ujaque, José L. Mascareñas, Fernando López "Skeletal Diversity in Pt- and Au-Catalyzed Annulations of Allenedienes: Dissecting the Mechanistic Labyrinth"

Chemical Science, 11, 4209-4220 (2020).

123. Agustí Lledós, Gregori Ujaque, Odile Eisenstein “What Makes a Good (Computed) Energy Profile?”
Topics in Organometallic Chemistry, 67, 1-38 (2020).
124. Giuseppe Sciortino, Sara Muñoz-López, Agustí Lledós, Gregori Ujaque “Comparative Mechanistic Study on $[\text{Au}(\text{NHC})]^+$ Catalyzed Hydration of Alkynes, Alkenes and Allenes”
Organometallics, 39, 3469–3479 (2020).
125. Pablo Gómez-Orellana, Agustí Lledós, Gregori Ujaque “Computational Analysis on the Pd-Catalyzed C-N Coupling of Ammonia with Aryl Bromides Using a Chelate Phosphine Ligand”
Journal of Organic Chemistry, 86, 4007–4017 (2021).
126. Gantulga Norjmaa, Pietro Vidossich, Jean-Didier Maréchal and Gregori Ujaque “Modeling Kinetics and Thermodynamics of Guest Encapsulation into the $[\text{M4L6}]^{12-}$ Supramolecular Organometallic Cage”
Journal of Chemical Information and Modelling, 61, 4370-4381 (2021).
127. Gantulga Norjmaa, Jean-Didier Maréchal and Gregori Ujaque “Origin of the Rate Acceleration in the C-C Reductive Elimination from Pt(IV)-complex in $[\text{M4L6}]^{12-}$ Supramolecular Metallocage”
Chemistry A European Journal, 27, 15973-15980 (2021)
128. Gantulga Norjmaa, Gregori Ujaque and Agustí Lledós “Beyond Continuum Solvent Models in Computational Homogeneous Catalysis”
Topics in Catalysis, 65, 118–140 (2022)
129. Gantulga Norjmaa, Fahmi Himo, Jean-Didier Maréchal and Gregori Ujaque “Catalysis by $[\text{Ga}_4\text{L}_6]^{12-}$ Metallocage on the Nazarov Cyclization: The Basicity of Complexed Alcohol is Key”
Chemistry A European Journal, 27, e202201792 (1 of 9) (2022)
130. Andrés M. Álvarez-Constantino, Andrea Álvarez-Pérez, Giuseppe Sciortino, Jesús A. Varela, Gregori Ujaque and Carlos Saá “Medium-Sized Ru-Catalyzed Oxidative Lactamization vs Hydroamination of Alkynylamines. An Intriguing DFT Mechanistic Analysis”
Journal of Organic Chemistry, 88, 1185-1193 (2023)
131. Jorge Escorihuela, Agustí Lledós, Gregori Ujaque “Anti-Markovnikov Intermolecular Hydroamination of Alkenes and Alkynes: A Mechanistic View”
Chemical Reviews, 123, 15, 939-9203 (2023)
132. Mercè Alemany-Chavarria, Gantulga Norjmaa, Giuseppe Sciortino, Gregori Ujaque “Molecular Modelling of encapsulation and reactivity within Metal-Organic Cages (MOCs)”

Advances in Catalysis, 75, 55-93 (2024)

133. Adrián Carbonell, Ignacio Izquierdo, David B. Guzmán Ríos, Gantulga Norjmaa, Gregori Ujaque, Antonio J. Martínez-Martínez,* Uwe Pischel,* “A Supramolecular Ga₂L₃ Coordination Cage with Dithienylethene-Catecholate Ligands: Synthesis, Characterization, and Photochemistry”
Inorganic Chemistry, 63, 19872-19884 (2024)
134. Iker Zapirain-Gysling, Gantulga Norjmaa, Jean-Didier Maréchal, Gregori Ujaque “Origin of catalysis by [Ga₄L₆]¹²⁻ metallocage on the Prins reaction”
ACS Catalysis, 14, 18722-18733 (2024)
135. Irina Bozhinovska,^{a,b} Gregori Ujaque,^a Matthias Westerhausen*^b and Agustí Lledós “Understanding alkali-metal driven hydro-phosphorylation: mechanism and challenges in the Pudovik reaction”
Catalysis Science and Technology, 15, 3888–3905 (2025)
DOI: 10.1039/D5CY00269A
136. Susana Ibáñez, Mercè Alemany-Chavarria, Louise N. Dawe, Gregori Ujaque, Eduardo Peris “Rocking (and shuttling) in a nanosized metallobox”
Angewandte Chemie, International Edition, e202514744 (2025)
137. Ignacio Izquierdo, Laura Martínez-Castro, Gregori Ujaque, Antonio J. Martínez-Martínez “Reversible Triply Interlocked Main-Group Cages Al₆L₄ and Ga₆L₄”
Chemical Science, accepted (2025)
138. Gantulga Norjmaa, Susana Ibáñez, Eduardo Peris, Jean-Didier Maréchal, Gregori Ujaque “Unforeseen guest binding mechanism of polycyclic aromatic hydrocarbons by Au(I) metallo-tweezers revealed by computation”
Inorganic Chemistry, accepted (2025)

EL = Libros Editados

- Agustí Lledós and Gregori Ujaque, editors.
Topics in Organometallic Chemistry:
New Directions in the Modelling of Organometallic Reactions
Vol 67. Springer 2020
ISBN 978-3-030-56995-2
DOI:10.1007/978-3-030-56996-9

CL = Capítulos de libro

- Ataualpa A.C. Braga, Gregori Ujaque and Feliu Maseras
“The Mechanism of Palladium Catalyzed Cross-Coupling Reactions”

Eds. D.J. Musaev and K. Morokuma
Computational Modeling for Homogeneous and Enzymatic Catalysis
Wiley-VCH, Weinheim (2008).

- Aleix Comas-Vives, Gregori Ujaque and Agustí Lledós
“Inner- and Outer-Sphere Hydrogenation Mechanisms: A Computational Perspective”
Advances in Inorganic Chemistry, Vol. 62, 231-260 (2010).
Eds. Rudi van Eldyk and Jeremy N. Harvey
- Max Garcia-Melchor, Gregori Ujaque, Feliu Maseras and Agustí Lledós
“Theoretical Evaluation of Phosphine Effects in Cross-Coupling Reactions”
Eds. Luca Gonsalvi and Maurizio Peruzzini,
Phosphorous Compounds, Catalysis by Metal Complexes (CMCO)
Catalysis and Material Science Applications, Vol. 37, Springer (2011). Page 57-84.
DOI: 10.1007/978-90-481-3817-3_3
- Christophe Gourlaouen, Ataulpa A. C. Braga, Gregori Ujaque, Feliu Maseras
“Homogeneous computational catalysis: the mechanism for cross-coupling and other C-C bond formation processes”
Eds. Craig L. Hill and Djamaladdin G. Musaev
Book title: Complexity in Chemistry and Beyond: Interplay Theory and Experiment
Subtitle: New and old aspects of complexity in modern research
NATO Science for Peace and Security Series B: Physics and Biophysics 2012, pp 185-206, Springer Science+Business Media Dordrecht
DOI 10.1007/978-94-007-5548-2_11
- M. García-Melchor, X. Solans-Monfort, G. Ujaque
“C-C Bond Formation”
Jan Reedijk and Kenneth Poeppelmeier, editors.
Comprehensive Inorganic Chemistry II: From Elements to Applications
Vol 9. Oxford: Elsevier; 2013. p. 767-805.
B978-0-08-097774-4.00932-3
- O. Eisenstein, G. Ujaque, A. Lledós
“What makes for a Good (Computed) Energy Profile?”
Agustí Lledós and Gregori Ujaque, editors.
Topics in Organometallic Chemistry:
New Directions in the Modelling of Organometallic Reactions
Vol 67. Springer Nature Switzerland AG2020. p. 1-38
DOI:10.1007/3418_2020_57
- Giuseppe Sciortino, Gantulga Norjmaa, Jean-Didier Maréchal, Gregori Ujaque
“Catalysis by Metal Organic Cages: A Computational Perspective”
Eds. Matthieu Raynal and Piet van Leeuwen
“*Supramolecular Catalysis; New Directions and Developments*”
Wiley-VCH, (2022). ISBN-10: 3527349022

Participación en contratos de I+D de especial relevancia con Empresas y/o Administraciones (nacionales y/o internacionales)

Título del contrato/proyecto: Investigador Ramon y Cajal

Tipo de contrato: Investigador

Empresa/Administración financiadora: MCyT

Entidades participantes: UAB

Duración, desde: 2003 *hasta:* 2008

Investigador responsable: Gregori Ujaque Pérez

Número de investigadores participantes: 1

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 6.000,00 euros

Título del contrato/proyecto: New Chemistry and Catálisis with Hydride Compounds (HYDROCHEM; Project RTN nº HPRN-CT-2002-00176)

Tipo de contrato: IHP: Research Training Networks

Empresa/Administración financiadora: European Comission

Entidades participantes: UAB, CNRS-Université de Bourgogne (Francia), CNR-Firenze (Italia), University of York (Reino Unido), Shell Research and Technology Centre (Holanda), Università di Milano (Italia), Russian Academy of Sciences (Moscú, Rusia)

Duración, desde: 2002 *hasta:* 2006

Investigador responsable: Agustí Lledós, R. Poli (coordinador), M. Peruzzini, S. Duckett, E. Drent, A. Albinati, E. Vorontsov

Número de investigadores participantes: 38

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 1.142.000,00 €

Título del contrato/proyecto: Transition Metal Chemistry and Catalysis in Aqueous Media (AQUACHEM; MRTN-CT-2003-503864)

Tipo de contrato: IHP: Research Training Networks

Empresa/Administración financiadora: European Comission

Entidades participantes: UAB, CNR-ICCOM-Firenze (Italia), CNRS-LCC-Toulouse (Francia), University of Debrecen (Hungria), The Hebrew University of Jerusalem (Israel), University of York (Reino Unido), University of Erlangen-Nürnberg (Alemania), Instituto Superior Técnico (Portugal), Universidad de Almería, A.N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compunds-RAS (Rusia)

Duración, desde: 2004 *hasta:* 2006

Investigador responsable: Agustí Lledós (UAB), M. Peruzzini (coordinador), R. Poli, F. Joó, L. Ovadia, R. Perutz, R. Van Eldik, A. Pombeiro, A. Romerosa, E. Shubina

Número de investigadores participantes: 50

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 1.898.995,44 €

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Título del contrato/proyecto: Desarrollo de entidades organometálicas para reacciones de funcionalización selectiva de moléculas orgánicas (Proyecto Consolider Ingenio 2010: CSD2007-00006)

Tipo de contrato: Proyecto Consolider Ingenio 2010

Empresa/Administración financiadora: MEC

Entidades participantes: Univ. Zaragoza, Univ. Valencia, Univ. Oviedo, UAB, Univ. Santiago, Univ. Castilla-La Mancha, Univ. Sevilla-IIQ, Univ. Complutense Madrid, Univ. Alicante, Univ. York

Duración, desde: 2008 *hasta:* 2012

Investigador responsable: M.A. Esteruelas (coordinador), G. Asensio, J. Gimeno, A. Lledós, A. Vallribera, J. L. Mascareñas, A. Otero, M. Paneque, M. A. Sierra, M. Yus, S. Duckett

Número de investigadores participantes: 100

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 5.000.000,00 €

Título del contrato/proyecto: Catalytic Routines for Small Molecule Activation (CARISMA)

Tipo de contrato: COST Action

Empresa/Administración financiadora: European Commission

Entidades participantes: UAB, CNR-ICCOM-Firenze (Italia), CNRS-LCC-Toulouse (Francia), University of Debrecen (Hungria), The Hebrew University of Jerusalem (Israel), University of York (Reino Unido), University of Erlangen-Nürnberg (Alemania), Instituto Superior Técnico (Portugal), Universidad de Almería, A.N. Nesmeyanov Institute of Organoelement Compounds-RAS (Rusia)

Duración, desde: 2004 *hasta:* 2006

Investigador responsable: Martin Albrecht (Chair), Agustí Lledós (UAB)

Número de investigadores participantes: mayor de 50

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: €

Título del contrato/proyecto:

Tipo de contrato:

Empresa/Administración financiadora:

Entidades participantes:

Duración, desde: hasta:

Investigador responsable:

Número de investigadores participantes:

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO:

Patentes y Modelos de utilidad

Inventores (p.o. de firma):

Título:

N. de solicitud:

País de prioridad:

Fecha de prioridad:

Entidad titular:

Países a los que se ha extendido:

Empresa/s que la están explotando:

Inventores (p.o. de firma):

Título:

N. de solicitud:

País de prioridad:

Fecha de prioridad:

Entidad titular:

Países a los que se ha extendido:

Empresa/s que la están explotando:

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Estancias en Centros extranjeros
(estancias continuadas superiores a un mes)

CLAVE: D = doctorado, P = postdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras (especificar).

Centro:			
Localidad:	País	Fecha:	Duración (semanas):
Tema:			
Clave:			

CENTRO: Université de Montpellier II
LOCALIDAD: Montpellier PAIS: Francia AÑO: 1997 DURACIÓN: 3 meses
TEMA: Influencia de los Efectos Estéricos en los Complejos de Metales de Transición
EL SOLICITANTE REALIZÓ SU ESTANCIA EN CALIDAD DE: Estudiante de doctorado visitante.

CENTRO: Departamento de Física. Universidad de Estocolmo
LOCALIDAD: Estocolmo PAIS: Suecia AÑO: 1998 DURACIÓN: 3 meses
TEMA: Determinación de los mecanismos de acción de los enzimas Fe-Ni hidrogenasa y Tirosinasa mediante el método IMOMM, un híbrido QM/MM.
EL SOLICITANTE REALIZÓ SU ESTANCIA EN CALIDAD DE: Estudiante de doctorado visitante.

CENTRO: Departamento de Química y Bioquímica, Universidad de California, Los Angeles (UCLA)
LOCALIDAD: Los, Angeles PAIS: E.E.U.U. AÑO: 1999 DURACIÓN: 2 años
TEMA: Biotecnología Molecular: Diseño racional de anticuerpos. Factores que afectan la regioselectividad y estereoselectividad en las reacciones de ciclación.
EL SOLICITANTE REALIZÓ SU ESTANCIA EN CALIDAD DE: Estancia postdoctoral

CENTRO: Chemical Research Center, Budapest
LOCALIDAD: Budapest PAIS: Hungría AÑO: 2010 DURACIÓN: 10 días
TEMA: Simulation of Catalytic process in Water. Application of Ab Initio Molecular Dynamic Methods.
EL SOLICITANTE REALIZÓ SU ESTANCIA EN CALIDAD DE: Investigador visitante

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Contribuciones a Congresos
(Se reseñan solamente las contribuciones más relevantes)

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Asymmetric Catalysis Studied by Means of QM/MM Methods: The Dihydroxylation of Olefins by OsO₄(DHQD)2PYDZ

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia invitada**

CONGRESO: Computer Modelling of Chemical and Biological Systems

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oporto, Portugal

AÑO: 2003

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: The Osmium Asymmetric Dihydroxylation of Olefins Studied by Means of QM/MM Methods

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación oral**

CONGRESO: 29^o Congrès des Chimistes Théoriciens d'Expression Latine

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Marrakech, Marruecos

AÑO: 2003

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Applications of QM/MM Methods to Homogeneous Catalysis

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia invitada**

CONGRESO: 13th International Congress on Catalysis

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: París, Francia.

AÑO: Julio, 2004.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: QM/MM Methods Applied to Homogeneous and Bioinorganic Catalysis Problems.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación oral**

CONGRESO: EURESCO (Inorganic Chemistry)

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Sant Feliu de Guixols, Girona, España. AÑO: Septiembre, 2004.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: La Química Computacional Aplicada a la Catálisis Homogénea.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación oral**

CONGRESO: 1er Simposium de Investigadores Jóvenes (RSEQ-Sigma-Aldrich)

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid, España.

AÑO: Noviembre, 2004.

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: The Mechanism of Cross-Coupling Reactions from a Theoretical View
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación oral**
CONGRESO: From H₃ to Biochemistry. Conference in Honor of Prof. Per Siegbahn.
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Estocolmo, Suecia. AÑO: Junio, 2005.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: A Molecular Vision of Cross-Coupling Reactions
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia inviatada**
CONGRESO: 8th FIGIPAS
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Atenas,Grecia. AÑO: Julio, 2005.

AUTORES: Gregori Ujaque, A. Comas-Vives, C. González-Arellano, A. Corma, M. Iglesias, F. Sánchez
TÍTULO: Gold(III) Complexes as Hydrogenation Catalysts: Mechanistic Analysis
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación oral**
CONGRESO: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2006)
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santiago de Compostela, Espana. AÑO: Julio, 2006.

AUTORES: Gregori Ujaque, A. Comas-Vives, C. González-Arellano, A. Corma, M. Iglesias, F. Sánchez
TÍTULO: Gold(III) Hydrogenation Catalysts: Mechanistic Analysis of the H₂ Heterolytic Activation
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación oral**
CONGRESO: International Conference on Organometallic Chemistry (ICOMC 2006)
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Zaragoza, Espana. AÑO: Julio, 2006.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Molecular Modelling Applied to Catalysis
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación oral**
CONGRESO: 1^a Reunión de la RedCASI
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Palma de Mallorca, Espana. AÑO: Octubre, 2006.

AUTORES: Gregori Ujaque, A. Lledós, R. Poli
TÍTULO: A New Ir Catalyst with Ferrocenyl P,S Ligands for Asymmetric Hydrogenation of Ketones: A Mechanistic Study
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación oral**
CONGRESO: 2es Jornades Franco-Catalanes de Química Molecular
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Toulouse, Francia. AÑO: Febrero, 2007.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Molecular Modelling Applied to Understand Catalytic Reaction Mechanisms

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación oral**

CONGRESO: 1ª Reunión Consolider Ingenio 2010

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Jaca, España. AÑO: Noviembre, 2007.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Molecular Modelling in Homogeneous Catalysis: a “Golden” Era

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**

CONGRESO: Ciclo conferencias Instituto Universitario de Química Organometálica “Enrique Moles”.

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oviedo, España. AÑO: Julio, 2009.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Reaction Mechanisms in Gold catalyzed processes

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**

CONGRESO: Conferencia invitada en la Universidad de Estocolmo.

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Stockholm, Sweden. AÑO: Diciembre, 2009.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: A “Golden” era in Catalysis: Mechanistic Implications

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**

CONGRESO: DETIC-10.

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Montpellier, France. AÑO: Junio, 2010.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: A Step Forward in the Simulation of Catalytic Processes in Water: The Wacker Process

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**

CONGRESO: GEQO-10.

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Huelva, España. AÑO: Septiembre, 2010.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Simulation of Catalytic Processes in Water

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación oral**

CONGRESO: 3ª Reunión de la RedCASI

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Palma de Mallorca, España. AÑO: Octubre, 2010.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Homogeneous Catalysis in Water: Insights from Ab Initio Molecular Dynamics

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**

CONGRESO: Université Montpellier 2

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Montpellier, France. AÑO: Mayo, 2011.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Simulation of Catalytic Processes

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Curso** (Máster en Catálisis Homogénea)

CONGRESO: Máster en Catálisis Homogénea

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Castellón, Spain.

AÑO: 10 Febrero, 2011.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Homogeneous Catalysis in Water: Insights from AIMD

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**

CONGRESO: XRQTC (Xarxa de Referència en Química Teòrica i Computacional)

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Tarragona, Spain.

AÑO: 22-23 Junio, 2011.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: AIMD approach to transition metal catalyzed reactions in water

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación Oral**

CONGRESO: WATOC 2011.

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santiago de Compostela, Spain. AÑO: 17-25 Julio, 2011.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Simulation of Catalysis in Water: insights from AIMD

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**

CONGRESO: Challenges in Homogeneous Computational Chemistry.

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Stockholm, Sweden.

AÑO: 24-25 Agosto, 2011.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: A Mechanistic Viewpoint on Gold-Catalyzed Hydroamination and Hydroalkoxylation Processes

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**

CONGRESO: Universidad de Zaragoza

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Zaragoza, Spain.

AÑO: 29 Mayo, 2012.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: AIMD approach to Homogeneous Catalysis: The Wacker and Shilov Reactions

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación Oral**

CONGRESO: 8th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA)

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona, Spain.

AÑO: 26-29 Junio, 2012.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: The Transmetallation Process in Suzuki-Miyaura Reaction
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación oral**
CONGRESO: VI International School on Organometallic Chemistry “Marcial Moreno Mañas”
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Alicante, España. AÑO: 3-5 Junio, 2013.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Computational Challenges in Cross-Coupling Reactions
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**
CONGRESO: Challenges in Homogeneous Computational Chemistry.
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Stockholm, Sweden. AÑO: 13-14 Junio, 2013.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Suzuki-Miyaura Reaction: A Dilemma on the Transmetallation Process
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación Oral**
CONGRESO: XXXIV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santander, Spain AÑO: 15-18 Septiembre, 2013.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Simulations in Homogeneous Catalysis: A Step Forward in Solvent Description
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**
CONGRESO: Universidad de Valladolid
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Valladolid, Spain AÑO: 11 Febrero 2014.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Dealing with Solvent in Homogeneous Catalysis Simulations
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación Oral**
CONGRESO: COST-CARISMA
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Venice, Italy AÑO: 5-7 Mayo 2014.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Mechanistic Insights on the Regioselective Rh catalyzed Hydroamination of Alkenes
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**
CONGRESO: PRE-OMCOS
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: ICIQ, Tarragona, Spain AÑO: 25-6 Junio 2015.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: AIMD Applications to Organometallic Reactivity
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**
CONGRESO: 3rd Challenges in Homogeneous Computational Chemistry.
PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Stockholm, Sweden. AÑO: 3-4 Septiembre, 2015.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Es poden “veure” les molècules ballant? Si i canviant de parella !

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**

CONGRESO: Visites a grans instal·lacions organitzada per la Societat Catalana de Química: Barcelona Supercomputing Center

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona, Spain. AÑO: 4 abril, 2016.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Origin of Regioselectivity in Metal-catalyzed Hydroamination Reactions

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación Oral**

CONGRESO: Girona Seminar: Predictive Catalysis

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Girona, Spain. AÑO: 18-20 abril, 2016.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Dealing with water in Au-catalyzed Hydration of Unsaturated Compounds

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**

CONGRESO: 4th Challenges in Homogeneous Computational Chemistry.

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Stockholm, Sweden. AÑO: 14-16 Junio, 2017.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Understanding and Predicting Transition Metal Catalyzed Regioselective Hydroamination of Alkenes

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**

CONGRESO: Conference on Green Chemistry and Sustainable Catalysis.

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Wuhan, China AÑO: 25-27 Noviembre, 2018.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Transition Metal Catalyzed Addition of N-, O-Nucleophiles to Unsaturated Bonds: Mechanistic Implications

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**

CONGRESO: Invitado por el Instituto QUIFIMA, Universidad de Valladolid

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Valladolid, España AÑO: 12 Febrero, 2019.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Host-Guest Binding and Catalysis by Supramolecular Cages: a Computational Perspective

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación Oral**

CONGRESO: XXVII Bienal de Química de la RSEQ

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: San Sebastián, España AÑO: 26-30 Mayo, 2019.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: M_4L_6 Supramolecular Catalysis on C-C Reductive Elimination from Au(III) Complexes

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**

CONGRESO: Invitado por el Instituto QUIFIMA, Universidad de Valladolid

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Valladolid, España AÑO: 11 Febrero, 2020.

AUTORES: Gantulga Norjmaa, Jean Didier Maréchal, Gregori Ujaque

TÍTULO: Metal-Organic Cages $[(Ga_4L_6)^{12-}]$ as Catalysts: Computational Evaluation of Au(III) / C-C Reductive Elimination.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación Oral**

CONGRESO: International School of Chemistry

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Camerino, Italia (Webminar) AÑO: 1-6 Septiembre, 2020.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Binding and rate acceleration by a $[M_4L_6]^{12-}$ Metal Organic Cage.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**

CONGRESO: 5th Webinar Series on Catalysts - an Open Access Journal

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Webminar AÑO: 27 Enero, 2021.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Supramolecular Catalysis by Metallocages: Modelling Kinetics and Thermodynamics.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Oral**

CONGRESO: Cutting-Edge Homogeneous Catalysis – CEHC-2

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Leipzig AÑO: 29-31 Marzo, 2022.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Modelling Host-Guest Catalysis by Metallocages:

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Oral**

CONGRESO: XL GEQO

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona AÑO: 7-9 Septiembre, 2022.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Encapsulation and Reactivity Inside Metallocages

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Oral**

CONGRESO: XXV Conference on Organometallic Chemistry - EuCOMC

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Alcalá de Henares AÑO: 4-8 Septiembre, 2023.

AUTORES: Gregori Ujaque

TÍTULO: Modelling reactivity in the confined space of metallocages

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Plenaria**

CONGRESO: Photoinduced, Charge-Driven, and Molecular Processes under Confinement
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Bad Honnef, Germany AÑO: 24-28 Septiembre, 2023.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Reactivity Inside Metallocages: A Molecular View
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Oral**
CONGRESO: 5th Cutting Edge Homogeneous Catalysis / HC3A Meeting
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Montpellier AÑO: 15-17 Enero, 2024.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Binding Affinity and Reaction Rates within Metal-Organic Cages
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Oral**
CONGRESO: Modelling supramolecular catalysis: Methods and Applications (CECAM)
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: París AÑO: 12-14 Mayo, 2024.

AUTORES: Gregori Ujaque,* M. Alemany-Chavarria, I.G. Zapiain, G. Norjmaa, G. Sciortino
TÍTULO: Origin of Rate Enhancement by Metallocages: A Molecular Description
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Oral**
CONGRESO: Girona Seminar
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Girona AÑO: 28-31 Mayo, 2024.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Reactivity Inside Metal Organic Cages
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**
CONGRESO: Chemistry@Sete (Celebrating Odile Eisenstein's 75 birthday)
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Sete AÑO: 2-5 Junio, 2024.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Why Coordination Cages Accelerate Chemical Reactions?
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Oral**
CONGRESO: 9th EuChemS – Chemistry Congress
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Dublin AÑO: 7-11 Julio, 2024.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: The Molecular Basis of Rate Enhancement in Metallocage Systems
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**
CONGRESO: Trinity College
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Dublin AÑO: 12 Julio, 2024.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Binding and Reactivity in the Pockets of Supramolecular Structures
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**
CONGRESO: 3rd International Electronic Conference on Catalysis Sciences
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: En línea AÑO: 23-25 Mayo, 2025.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Exploring the Binding and Reactivity in Metal Organic Cages
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**
CONGRESO: Advances in Chemistry – Research and Development (Chem R&D)
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Frankfurt, Alemania AÑO: 28-30 Mayo, 2025.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Unexpected Origin of Catalysis in Metal Organic Cages
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**
CONGRESO: HRC 2025
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Dresden, Alemania AÑO: 29 Jun-1 Jul, 2025.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Molecular Modeling of Confined Spaces in Nanocages
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Plenaria**
CONGRESO: 3rd International Symposium on Confinement-Controlled Chemistry 2025
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Bochum, Alemania AÑO: 15-17 Sep, 2025.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Modelling Encapsulation and Catalysis by Metallocages
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**
CONGRESO: International Conference of Computational Organic-synthesis Catalysis (ICCOC2025)
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Shenzhen, China AÑO: 25-27 Oct, 2025.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Modelling Encapsulation and Catalysis by Metallocages
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**
CONGRESO: International Conference of Computational Organic-synthesis Catalysis (ICCOC2025)
PUBLICACIÓN:
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Wuhan, China AÑO: 28 Oct, 2025.

AUTORES: Gregori Ujaque
TÍTULO: Modelling Encapsulation and Catalysis by Metallocages
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**

CONGRESO: International Conference of Computational Organic-synthesis Catalysis (ICCOC2025)

PUBLICACIÓN:

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Pekin, China AÑO: 30 Oct, 2025.

Tesis Doctorales dirigidas

Título: A Computational Approach to the Synthesis of Chiral Sulfoxides

Doctorando: David Balcells Badia

Universidad: Universitat Autònoma de Barcelona

Facultad / Escuela: Facultat de Ciències, Departament de Química

Fecha: 29-junio-2006

Título: Estudi Computacional de mecanismes de reacció en sistemes organometàl·lics

Doctorando: Ainara Nova Flores

Universidad: Universitat Autònoma de Barcelona

Facultad / Escuela: Facultat de Ciències, Departament de Química

Fecha: 21-abril-2008

Título: Estudi teòric de reaccions d'hidrogenació i d'oxidació en processos de catàlisi homogènia

Doctorando: Aleix Comas Vives

Universidad: Universitat Autònoma de Barcelona

Facultad / Escuela: Facultat de Ciències, Departament de Química

Fecha: 26-junio-2009

Título: A Computational Approach to Coordination Chemistry: Structure, Reactivity and NMR Studies

Doctorando: Salvador Moncho Escrivà

Universidad: Universitat Autònoma de Barcelona

Facultad / Escuela: Facultat de Ciències, Departament de Química

Fecha: 16-julio-2010

Título: Theoretical Study on Pd-catalyzed Cross-Coupling Reactions

Doctorando: Max Garcia Melchor

Universidad: Universitat Autònoma de Barcelona

Facultad / Escuela: Facultat de Ciències, Departament de Química

Fecha: 13 - abril - 2012

Título: Estudi Teòric de Reaccions Catalitzades per Complexos d'Or: Cicloadicions amb Al·lens i Oxidació d'Alquins

Doctorando: Sergi Montserrat Gironès

Universidad: Universitat Autònoma de Barcelona

Facultad / Escuela: Facultat de Ciències, Departament de Química

Fecha: 1 - marzo - 2013

Título: Scope of Computational Organometallic Chemistry: Structure, Reactivity and Properties

Doctorando: Manuel Angel Ortuño Maqueda

Universidad: Universitat Autònoma de Barcelona

Facultad / Escuela: Facultat de Ciències, Departament de Química
Fecha: 28 - noviembre - 2014

Título: Mechanistic Insights into Metal-Catalyzed Hydroamination Reactions
Doctorando: Almudena Couce Ríos
Universidad: Universitat Autònoma de Barcelona
Facultad / Escuela: Facultat de Ciències, Departament de Química
Fecha: 29 - marzo - 2017

Título: Estudio Mecánico de Reacciones de Aminación y de Hidroaminación
Doctorando: Pablo Gómez-Orellana Seguí
Universidad: Universitat Autònoma de Barcelona
Facultad / Escuela: Facultat de Ciències, Departament de Química
Fecha: 13 - mayo - 2019

Título: Molecular Modelling of Encapsulation and Catalysis in Supramolecular Metallocages
Doctorando: Gantulga Norjmaa
Universidad: Universitat Autònoma de Barcelona
Facultad / Escuela: Facultat de Ciències, Departament de Química
Fecha: 1 - diciembre - 2021

Título: From Supramolecular Catalysts to Protein-Metal Interactions: a computational study of metal-containing complexes
Doctorando: Iker Zapirain Gysling
Universidad: Universitat Autònoma de Barcelona
Facultad / Escuela: Facultat de Ciències, Departament de Química
Fecha: 25 - febrero - 2025

Participación en comités y representaciones internacionales

Título del Comité: Panel de Evaluación del ámbito de Química y Nueva Tecnología de Materiales

Entidad de la que depende: Red Española de Supercomputación (RES/BSC).
Tema: Química y Materiales

Fecha: Junio 2017 - ...

Título del Comité:

Entidad de la que depende:
Tema:

Fecha:

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Experiencia en organización de actividades de I+D

Organización de congresos, seminarios, jornadas, etc., científicos-tecnológicos

Título: XXI Reunió de la Xarxa de Química Teòrica
Tipo de actividad: Miembro del Comité Organizador
(secretario)

Ambito: Nacional

Lugar celebración: Bellaterra (Barcelona)
Fecha: Julio 2005

Título: DETIC-06 (Dialogues Experiment-Theory in Chemistry)
Tipo de actividad: Miembro del Comité Organizador
(secretario)

Ambito: Internacional

Lugar celebración: Bellaterra (Barcelona)
Fecha: Febrero 2006

Título: Experiment & Theory in Transition Metal Chemistry: A Meeting Point
Tipo de actividad: Miembro del Comité Organizador
(secretario)
Lugar celebración: Bellaterra (Barcelona)
Fecha: Octubre 2006

Título: Ciclo de Conferencias de Química (Dep. Química UAB)
Tipo de actividad: Responsable de la organización
Fecha: 2008-

Ambito: Internacional

Título: Coordinación Actos Año Internacional de la Química – 2011
Tipo de actividad: Responsable del Dep. de Química de UAB
de organizar los actos relacionados con el Año Internacional
de la Química – 2011.
Fecha: 2010-2011

Título: VIII Trobada de Joves Investigadors de Catalunya – 2013
Tipo de actividad: Co-Responsable de la organización del
Congreso.
Lugar celebración: Andorra
Fecha: Noviembre 2013

Título: VII International School on Organometallic Chemistry – Marcial Moreno Mañas
Tipo de actividad: Responsable de la organización
Lugar celebración: Bellaterra (Barcelona)
Fecha: Junio 2014

Título: IX Trobada de Joves Investigadors de Catalunya – 2016
Tipo de actividad: Co-Responsable de la organización del

Ambito: Nacional

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Congreso.
Lugar celebración: Perpiñan
Fecha: Febrero 2016

Título: Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química – RSEQ-2017
Tipo de actividad: Co-Responsable de la organización del Congreso. Ambito: Internacional
Lugar celebración: Sitges
Fecha: 25-29 Junio 2017

Título: 11th European Conference on Theoretical and Computational Chemistry
Tipo de actividad: Co-Responsable de la organización del Congreso. Ambito: Internacional
Lugar celebración: Barcelona
Fecha: 4-7 Septiembre, 2017

Título: X Trobada de Joves Investigadors de Catalunya – 2018
Tipo de actividad: Co-Responsable de la organización del Congreso. Ambito: Nacional
Lugar celebración: Barcelona
Fecha: 29-30 Enero 2018

Título: XXIII ISOM (International Symposium on Olefin Metathesis)
Tipo de actividad: Miembro del comité organizador. Ambito: Internacional
Lugar celebración: Barcelona
Fecha: 25-29 Julio 2019

Título: XXXVIII Reunión del Grupo Especializado de Química Organometálica de la RSEQ
Tipo de actividad: Miembro del comité científico. Ambito: Internacional
Lugar celebración: Barcelona
Fecha: 15-17 Julio 2020

Título: XX Conferencia Enric Casassas, titulada “Química i Llengua”
Tipo de actividad: Miembro del comité científico. Ambito: Nacional
Lugar celebración: Barcelona
Fecha: 23 Noviembre 2020

Título: 9th European Conference on Boron chemistry”
Tipo de actividad: Miembro del comité científico. Ambito: Internacional
Lugar celebración: Cerdanyola del Vallès, Barcelona
Fecha: 3-7 Julio 2022

Título: 1ª Reunió de Química Teòrica i Computacional (RQIO-SCQ)
Tipo de actividad: Miembro del comité científico. Ambito: Nacional
Lugar celebración: Sede del “Institut d'Estudis Catalans”, Barcelona
Fecha: 2-3 febrer 2023

Título: XIII Trobada de Joves Investigadors de Catalunya – 2024
Tipo de actividad: Co-Responsable de la organización del Congreso. Ambito: Nacional
Lugar celebración: Barcelona
Fecha: 29-31 Enero 2024

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Título: Catalytic Conversations: Integrating Theory and Experiment in Homogeneous Catalysis
Tipo de actividad: co-Responsable de la organización del Congreso. Ambito: Internacional
Lugar celebración: Barcelona
Fecha: 17-18 Julio 2025

Título: 4th Trans Pyrenean Meeting on Catalysis (TrapCat4)
Tipo de actividad: co-Responsable de la organización del Congreso. Ambito: Internacional
Lugar celebración: Barcelona
Fecha: 20-21 Noviembre 2025

Experiencia de gestión de I+D

Gestión de programas, planes y acciones de I+D

Título: Coordinador del área de investigación del Departamento de Química (UAB)
Tipo de actividad: Coordinación de todos los temas relacionados con la investigación desarrollada en el Departamento.
Fecha: 2008-2009

Título: Coordinador del área del Promoción del Departament de Química (UAB)

Título: Coordinador del Programa de Doctorado en Química (UAB; desde septiembre 2018).
Tipo de actividad: Responsable de todas las actividades relacionadas con el programa de Doctorado,
Fecha: desde septiembre 2018

Divulgación

- Responsable de la organización de las actividades del Año Internacional de la Química 2011 del Departamento de Química de la UAB.
- Organizador (junto con el Prof. Ramon Alibés) de la actividad "Química Interactiva" (una jornada en el laboratorio donde aproximadamente 800 estudiantes de secundaria visitan cada año la UAB). Responsable entre 2011 y 2017; participación como profesor entre 2018 y 2025.
- Organizador (junto con el Prof. Ramon Alibés) del ciclo de conferencias "La Química t'Envolta" durante el curso académico 2011-2012.
- Comisario (junto con el Prof. Ramon Alibés) de la exposición: "Gràcies a la Química (Gracias a la Química)". Exposición que tuvo lugar en la Hemeroteca de la UAB en 2011, y que permaneció expuesta en la Facultad de Ciencias de la UAB hasta 2018.
- Responsable del área de Promoción del Departamento de Química: entre las distintas tareas, fue responsable de la elaboración de la Tabla Periódica de cerámica que se encuentra en el vestíbulo de la Facultad de Ciencias de la UAB.
- Como presidente de la Sociedad Catalana de Química (SCQ) he impulsado las siguientes actividades:
 - Conferencia de divulgación sobre "Química Teórica y Computacional", en la sede del BSC en 2016.
 - Concurso de vídeos:
 - Edición 2022 – "Moléculas que han cambiado nuestras vidas"
 - Edición 2023 – "La Química de la Vida" (Año Joan Oró)
 - Edición 2024 – "H₂O, una molécula esencial"
 - Reconocimiento de Hitos Históricos de la Química:
 - 2021 – Antoni Martí i Franquès y Altafulla
 - 2022 – Fábrica de Azúcar de Vic

- 2023 – Laboratorio Químico del Ebro, Roquetes
 - 2024 – Drogueria Can Boter, Badalona
 - Lanzamiento de los Premios SCQ en las áreas de Investigación, Docencia y Divulgación. Ha habido 3 ediciones: 2021, 2022, 2023 y 2024. Este año 2025 está en curso la nueva edición.
- Participación en la mesa redonda “Les Ciències més enllà de l’aula” organizada por la plataforma “Ciències en perill” el día 1 de abril de 2025 en la sede del Institut d’Estudis Catalans.

Otros méritos o aclaraciones que se desee hacer constar
(utilice únicamente el espacio equivalente a una página).

-
- **Premio Extraordinario de Doctorado** (curso 1998-99)
Entidad otorgante: Universidad Autónoma de Barcelona
 - **“Young Scientist Prize”** of the International Association of Catalysis Societies (2004).
Concedido en París, Julio de 2004.
 - **Premio Sinergia Educativa 2012** (concedido por el Consell Social de la UAB) por la organización de la actividad “Química Interactiva” dedicada a fomentar el espíritu científico en alumnos de secundaria.
 - **Presidente de la Societat Catalana de Química (SCQ)** desde 2020.
 - Secretario de la Societat Catalana de Química (SCQ) (2014 – 2020)
 - **Editor asociado de la Revista “Anales de Química” de la Real Sociedad Española de Química** (2018-2020).
 - **Miembro del Editorial Board de la Revista “Catalysts”** (desde 2020).
 - **Miembro del panel de “Química y Nueva Tecnología de Materiales” que evalúa los proyectos para obtener tiempo de cálculo en la Red Española de Supercomputación (RES/BSC)** (2017-2021).
 - **Coordinador del Programa de Doctorado de Química de la UAB** (2018-2023).
 - Concedidos 5 tramos docentes estatales (último periodo 2019-2022).
 - Concedidos 5 tramos investigadores estatales (último periodo 2019-2014).
 - Habilitado para Profesor Titular en el área de conocimiento de Química Física (BOE Num. 66, resolución de 7 de marzo de 2007 de la Presidencia del Consejo de Coordinación Universitaria, página 11696).
 - Evaluación POSITIVA por parte de la Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Acreditación, ante la solicitud presentada para las categorías de Profesor Contratado Doctor, Profesor de Universidad Privada y Profesor Ayudante Doctor.

- Evaluación FAVORABLE por parte de la “Agencia per a la Qualitat del Sistema Universitari de Catalunya (AQU)” ante la solicitud presentada para las categorías de Profesor Agregado, Profesor Lector y Profesor Colaborador, y la “Acreditació de Recerca Avançada” (catedrático laboral).
- Evaluación POSITIVA del programa I3.
- Responsable del Departamento de Química para la organización de las actividades relacionadas con el Año Internacional de la Química – 2011.
- Responsable de la organización de la actividad “Química Interactiva” para estudiantes de bachillerato (2010-2016).
- Coordinador del Área de Promoción del Departament de Química (2014-2015).
- Coordinador del Área de Química Física del Departament de Química (1/10/2012 – 1/09/2015)
- Actividades de evaluación
Evaluador para las siguientes agencias de evaluación (por países):
España – Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva (ANEP)
USA – American Chemical Society-Petrol Research Fundation (ACS-PRF)
Francia – Agence Nationale de la Recherche (ANR)
Hungría – Hungarian Scientific Research Fund (OTKA)
Hong Kong – Research Grants Council (RGC)