

Suficiència investigadora

Xavier Prat Resina

13 de novembre 2001

Currículum Vitae

·Dades acadèmiques

Llicenciatura en química per la universitat de Barcelona del setembre del 1994 a febrer del 1999, havent cursat assignatures optatives de l'especialitat de química física i química orgànica.

Màster experimental en química per la UB amb el títol “estudi teòric del mecanisme de reaccions de carbonilació amb un catalitzador de níquel” març de 2000. Treball convalidat per la UAB com a treball de recerca.

·Aptituds

idiomes: parlat i escrit català, castellà, italià i anglès

informàtica: programació en fortran 77, HTML,

coneixement de sistemes operatius Windows, Mac OS, i UNIX/Linux

·Cursos de doctorat.

Programa de química teòrica i computacional

(UJI, Castelló febrer de 2000)

-Fonaments (3 crèdits)

-Mètodes de la química quàntica (3 crèdits)

-Tècniques computacionals (3 crèdits)

-Dinàmica de les reaccions químiques (3 crèdits)

-Modelització molecular (3 crèdits)

Programa de química

(UAB, primavera de 2000)

-Química Bioinorgànica (3 crèdits)

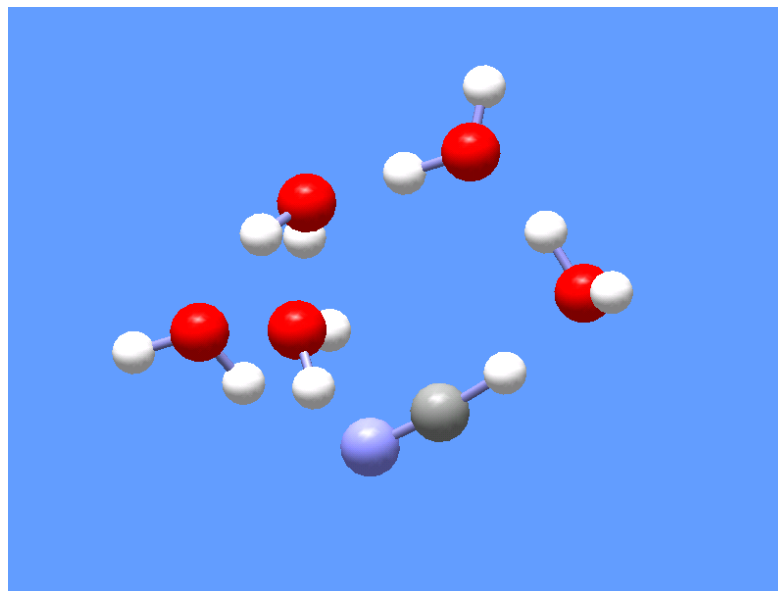
-Química Macrocíclica i Supramolecular (3 crèdits)

·Resum de la recerca científica

1997
1998
1999
2000
2001

Alumne intern al departament de Química Física
de la UB amb el prof. Juan J. Novoa

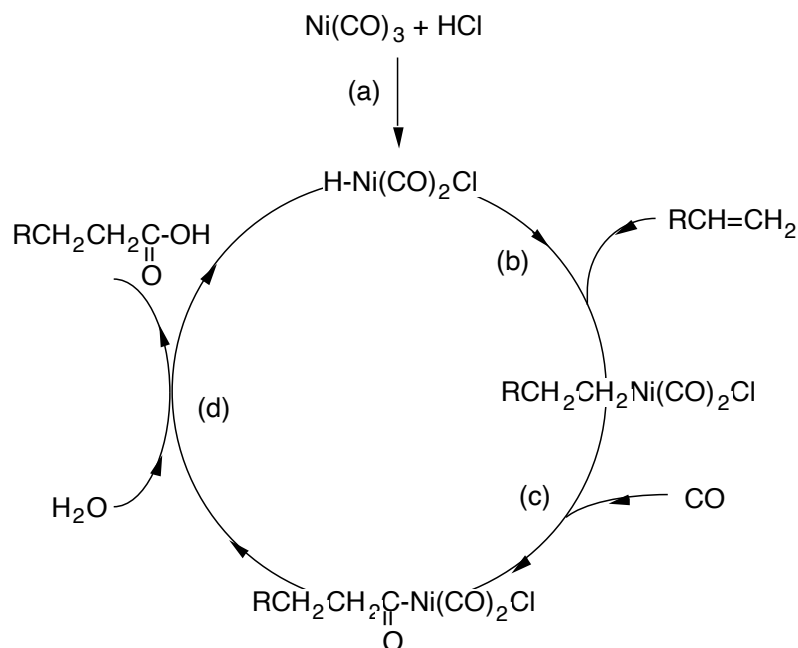
·estudi teòric de la transferència protònica en clústers
d'aigua i àcid cianhídric amb mètodes DFT



·Resum de la recerca científica

1997
1998
1999
2000
2001

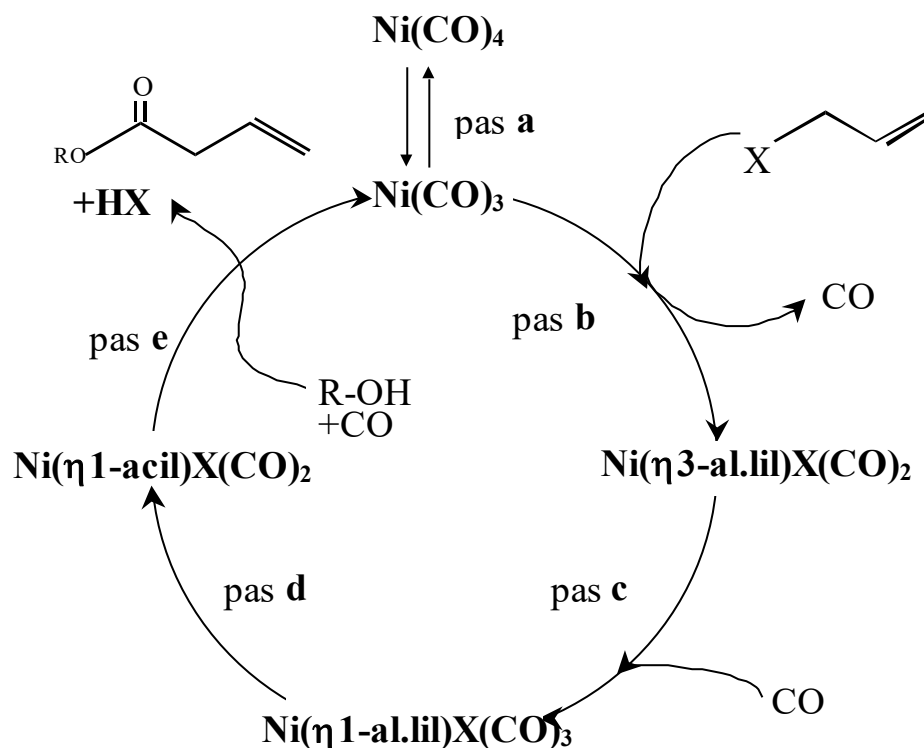
Estada durant l'estiu de 1998 amb una beca Erasmus a la universitat de Bolònia (Itàlia) amb el prof. Andrea Bottoni fent un estudi teòric del mecanisme de carbonilació d'olefines (Theoretical Study of the Mechanism of Carbonyl Insertion Reactions Catalyzed by Nickel Complexes, *Organometallics* **2000**, *19*, 2170-2178)



·Resum de la recerca científica

1997
1998
1999
2000
2001

Estada de sis mesos amb una beca TMR a la universitat de Bolònia amb el prof. Andrea Bottoni fent un estudi teòric del mecanisme de carbonilació d'halurs d'al.lil (treball en vies de publicació)

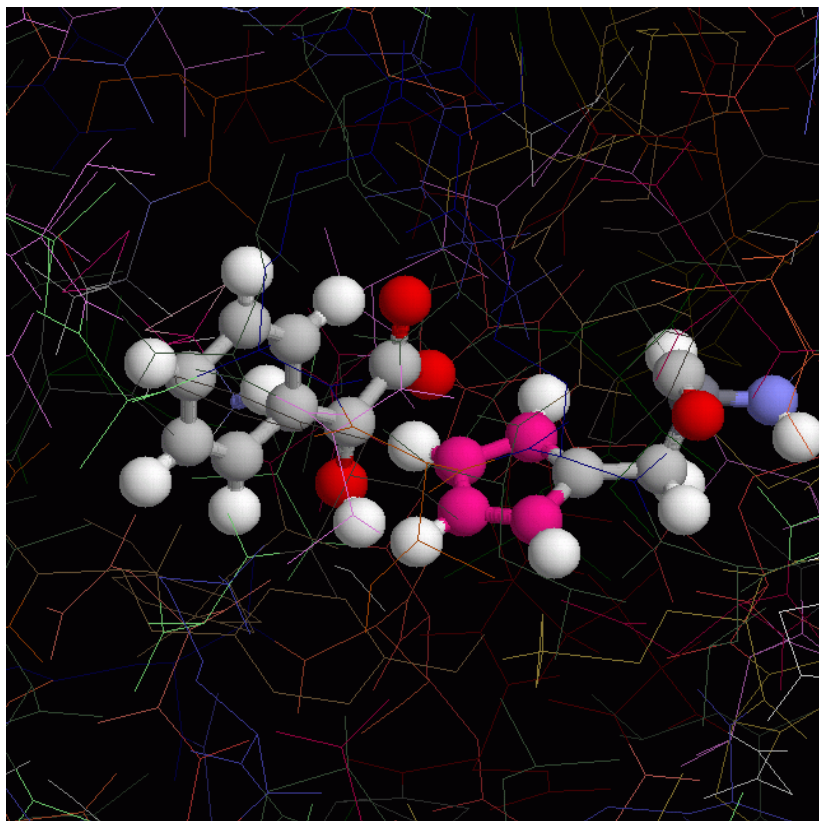


·Resum de la recerca científica

1997	Des del setembre de 1999 inici de tesi doctoral a la UAB sota la direcció d'Àngels González-Lafont i Josep Maria Lluch. Gaudint una beca predoctoral FI de la Generalitat de Catalunya
1998	Des de llavors he estat treballant en dos projectes:
1999	1.Cerca de punts estacionaris en superfícies QM/MM (On the search of stationary points on a QM/MM potential energy surface, Theoretical Chemistry Accounts, 2001 , <i>acceptat</i>) Treball en col.laboració amb en Josep Maria Bofill de la UB i amb en Gérald Monard de la universitat de Nancy.
2000	2.Estudi de la catàlisi enzimàtica de l'enzim mandelat racemasa amb mètodes QM/MM.
2001	(treball en vies de publicació)

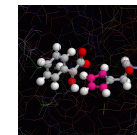
Projecte de tesi doctoral

L'estudi de sistemes enzimàtics reactius amb mètodes QM/MM



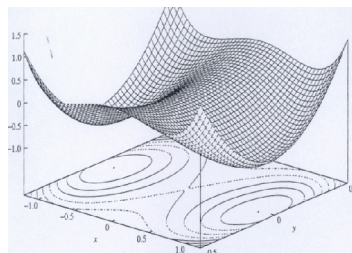
Projecte de tesi doctoral

L'estudi de sistemes enzimàtics reactius amb mètodes QM/MM

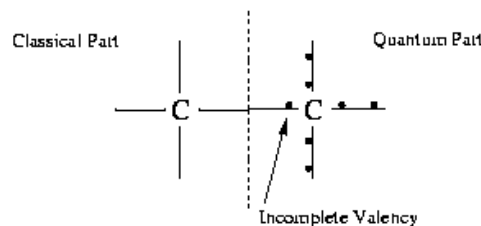


1. Estudi i desenvolupament del mètode QM/MM

1.1. Cerca de mínims i estats de transició en sistemes enzimàtics on hi ha milers de graus de llibertat



1.2. Estudi de la frontera QM/MM on diferents mètodes com el “link atom” o “LSCF” són possibles

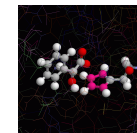


1.3. Estudi general de la interacció entre la part QM i MM

$$\hat{H} = \hat{H}_{\text{QM}} + \hat{H}_{\text{MM}} + \hat{H}_{\text{QM/MM}} + \hat{H}_{\text{Boundary}} \quad \hat{H}_{\text{QM/MM}} = -\sum_{iM} \frac{q_M}{r_{iM}} + \sum_{\alpha M} \frac{Z_{\alpha} q_M}{R_{\alpha M}} + \sum_{\alpha M} \left\{ \frac{A_{\alpha M}}{R_{\alpha M}^{12}} - \frac{B_{\alpha M}}{R_{\alpha M}^6} \right\}$$

Projecte de tesi doctoral

L'estudi de sistemes enzimàtics reactius amb mètodes QM/MM



2. Aplicació dels mètodes QM/MM per a l'estudi de mecanismes de reacció enzimàtics:

Exploració de la superfície d'energia potencial o càlcul d'energia lliure per sistemes, com per exemple, el mandelat racemasa, la cetoesteroid isomerasa o la triosafofat isomerasa.

