

# Investigadores en química computacional, en el ICIQ

■ L' Institut Català d'Investigació Química (ICIQ), uno de los centros de investigación química de referencia internacional, acoge desde hoy hasta el viernes un simposio en el que participarán expertos en química teórica y computacional de los principales centros de investigación de España y Japón.

La química computacional se aplica al estudio de procesos químicos con el objetivo de entender los mecanismos de reacción que tienen lugar y aplicar este conocimiento al diseño de procesos más eficientes. También se puede aplicar para la predicción del comportamiento de moléculas o sistemas.

«El objetivo principal de este simposio es intercambiar conocimientos y forjar lazos que

puedan llevar a futuras colaboraciones entre grupos de investigación de ambos países»-dijo el profesor Feliu Maseras, que junto a Carles Bo y Núria López, lidera tres grupos de investigación por separado en el ICIQ.

Estos tres grupos de investigación trabajan en el ámbito de la química teórica y computacional. Su trabajo se centra en el estudio de procesos catalíticos tanto homogéneos como heterogéneos, química de polioxometalatos y química supramolecular.

Actualmente, también trabajan de forma conjunta con la URV en el desarrollo de la plataforma ioChem-BD, para el manejo de *Big Data* en química computacional.