



UNIÃO EUROPEIA
Fundo Europeu
de Desenvolvimento Regional

Título: RDB-TS: A reaction database for transition state information from quantum chemical calculations (RDB-TS)

Região de intervenção: Norte

Código: NORTE-01-0145-FEDER-031689

Objetivo principal: 01 - Reforçar a investigação, o desenvolvimento tecnológico e a inovação

Instituição coordenadora: REQUIMTE - REDE DE QUÍMICA E DE TECNOLOGIA

Data de aprovação: 04/04/2018

Data de início: 01/07/2018

Data de fim: 30/06/2022

Custo total elegível: 233 026,68 €

Apoio financeiro da União Europeia: Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional - 198 070,98 €

Apoio financeiro da União Europeia (UMinho): Fundo Europeu de Desenvolvimento Regional - 53 942,66 €

Apoio financeiro público nacional: Orçamento de Estado - 34 953,70 €

Apoio financeiro público nacional (UMinho): Orçamento de Estado - 9 519,29 €

Entidade financiadora: Fundação para a Ciência e a Tecnologia | FCT

Prog. quadro: Portugal 2020

Prog. operacional: Programa Operacional Regional do Norte 2014-2020 | NORTE 2020

Investigador responsável: Alberto José Gonçalves Carvalho Proença

Unidade de Investigação: Centro Algoritmi

Objetivos, atividades e resultados esperados/atingidos:

The project aims to develop a Reaction DataBase with Transition State information, RDB-TS. A web portal will offer a comprehensive and open-access information on TS structures, obtained by quantum mechanics calculations from a wide range of scientific fields, namely organic and inorganic chemistry and enzymology. This structured information will be available for computational analyses, providing key resources in the identification, classification and comparative analysis of TS structures.