

## Departament de Química Física i Inorgànica

Campus Sescelades  
Marcel·lí Domingo, s/n – 43007 Tarragona  
Tel. 977 558 137 – Fax 977 559 563  
[secqfqi@urv.cat](mailto:secqfqi@urv.cat)

Dr. Josep M. Poblet Rius, director  
Dr. Joan Josep Carvajal Martí, secretari

El Departament de Química Física i Inorgànica (DQFI) agrupa els professors de les àrees de Química Física, Química Inorgànica, Física Aplicada i Cristal·lografia i Mineralogia.

### 1. Rendició de comptes

El Departament ha dut a terme polítiques actives que permetin l'acompliment del contracte programa signat a començament del curs 2011-12, el qual encara és vigent. En la taula 1 es resumeix el nombre de tesis doctorals defensades durant els cursos 2009-10, 2010-11, 2011-12, 2012-13 i 2013-14, que són els cursos en els quals es feia referència al contracte programa del Departament. També s'hi inclouen el nombre de tesis amb Menció Europea i el nombre de tesis escrites en anglès.

*Taula 1. Nombre de tesis doctorals defensades al Departament en el període de 2009-10 a 2013-14*

CURS	TESIS DEFENSADES	MENCIÓ EUROPEA	ESCRITES EN ANGLÈS
2009-10	10	9	9
2010-11	18	10	18
2011-12	12	8	10
2012-13	8	7	7
2013-14	11	5	10
TOTAL	59	39	54

En la taula 2, es presenta la mitjana de tesis doctorals defensades en aquest període, els percentatges que representen les tesis amb Menció Europea i les tesis escrites en anglès sobre el total de tesis defensades.

*Taula 2. Resum de les dades referents a tesis doctorals defensades d'acord amb els criteris marcats en el contracte programa per al període de 2009-10 a 2013-14*

	Total	Tesis fetes al Departament	Tesis fetes a l'ICIQ
MITJANA DE NOMBRE DE TESIS PER CURS	12,2	8,8	3,4
% TESIS AMB MENCIÓ EUROPEA	66%	69%	47%
% TESIS ESCRITES EN ANGLÈS	91,5%	86%	100%

D'acord amb les dades presentades, la mitjana de nombre de tesis defensades en aquest període supera les 8,5 tesis que ens havíem marcat en el contracte programa i el percentatge de tesis escrites en anglès també supera el llindar del 80% establert. Pel que fa al percentatge de tesis amb Menció Europea o Internacional, és del 66%, quedant per sota del llindar del 67,65% que ens havíem fixat. En aquest punt, cal tenir present, però, que també s'hi compten les tesis doctorals fetes a l'Institut Català d'Investigació Química (ICIQ), de les quals gairebé un 50% no tenen aquesta menció. Extraient aquestes tesis, el percentatge de les que tenen Menció Europea o Internacional és del 69%, per sobre del llindar establert.

Un altre punt que estem complint d'acord amb allò pactat en el contracte programa és l'elaboració de les memòries anuals d'activitats del Departament, com aquesta que es presenta.

Quant al nombre de publicacions en revistes indexades, la taula 3 presenta el nombre d'aquestes publicacions que els membres del Departament han dut a terme en el període 2010-13.

*Taula 3. Nombre de publicacions internacionals indexades (ISI)*

2010	76
2011	75
2012	80
2013	86

La mitjana del nombre de publicacions en aquest període és de 79,25, que queda per sobre del llindar establert de 70 publicacions que havíem fixat en el contracte programa.

També cal mencionar el total compliment dels indicadors d'accions singulars, que consisteixen en la participació en un projecte internacional EUA (NSF) – Estat espanyol i en la realització del Curs d'Iniciació a la Física, tal com ens havíem compromès en el contracte programa.

Finalment, pel que fa a projectes de recerca, cal dir que hem complert l'objectiu marcat en relació amb el nombre de projectes europeus i grans projectes en els quals participen investigadors del Departament, ja que s'han fet 7 projectes dins del 7è Programa Marc i 4 accions COST, durant tot el període avaluat, percentatge superior a la mitjana d'1 projecte que havíem marcat a l'inici del període.

Respecte al nombre de trams bàsics de recerca vius en relació amb els trams de recerca vius possibles, cal dir que hem assolit el llindar establert de 89 trams de recerca que havíem establert en el contracte programa.

La taula 4 presenta els ingressos obtinguts per via competitiva durant els anys 2010-13, i indica en quin programa s'han obtingut, segons les dades facilitades pel Servei de Gestió de la Recerca i completades a partir de la informació dels diferents grups de recerca del Departament.

*Taula 4. Ingressos obtinguts per via competitiva procedents de diferents projectes de recerca en el període 2010-13*

<i>Origen del finançament</i>	<i>2010</i>	<i>2011</i>	<i>2012</i>	<i>2013</i>
Altres	8.261,11	6.655,50	12.553,50	0
Plan Nacional	1.274.721,95	1.177.687,06	209.027,48	0
Pla de Recerca de Catalunya	773.380,20	151.754,37	565.245,67	0
Europa	311.985,00	88.480,00	2,00	1.077.505
URV	465.661,62	243.725,21	163.753,61	0
Total	2.834.009,88	1.659.302,14	950.582,26	1.077.505

La taula 5 mostra els ingressos obtinguts per via no competitiva, que han estat presos de les dades que figuren en el Pacte de Dedicació dels membres del Departament per al període 2010-11 i 2013-14 en l'apartat de "Transferència de tecnologia i coneixement".

*Taula 5. Ingressos obtinguts per via no competitiva procedents de projectes de recerca*

	Via no competitiva
2010-11	262.577,13
2011-12	1.436.951,03
2012-13	237.100,49
2013-14	558.981,00

Tot i que s'havia observat una evolució a la baixa en els recursos aconseguits els últims anys, coincidint amb l'agreujament de la crisi econòmica que estem patint i la reducció en l'adjudicació de recursos per recerca per part de les diferents administracions públiques, aquest darrer any s'observa un lleuger increment, encara que motivat per la captació de fons procedents de programes de recerca europeus, ja que enguany no hi ha ingressos procedents de projectes del Pla Nacional o de convocatòries lligades a l'AGAUR. De totes formes, els ingressos obtinguts superen els 700.000 € fixats en el Contracte Programa. D'altra banda, pel que fa als ingressos obtinguts per via no competitiva, es pot veure en la taula 5 que se superen els 200.000 € previstos en el Contracte Programa.

Tot això es reflecteix en un *compliment del Contracte Programa del 100%*.

## **2. Direcció estratègica i de govern**

Durant aquest període, el Departament de Química Física i Inorgànica (DQFI) ha desenvolupat diferents accions que s'enquadren en els eixos definits per la Universitat.

### **2.1 Qualitat i avaluació. Accions de millora i avaluació**

Referent a la qualitat i les accions de millora de la docència, els membres del Departament participen en la Comissió, de la Facultat de Química, de Seguiment i Qualitat Docent que treballa en el seguiment i la millora de la implantació del grau de Química.

La recerca continua sent una de les activitats prioritàries, mantenint-se una productivitat elevada i el nombre de projectes de recerca en els quals participen grups del Departament. A més a més, durant aquest curs s'ha impulsat l'elaboració de la *Memòria de Recerca* conjunta dels Departaments de Química Física i Inorgànica i Química Analítica i Química Orgànica corresponent al bienni 2011-2012, que es troba accessible a través de la web del Departament a l'adreça electrònica:

<<http://www.urv.cat/dqfi/noticies/54>>

També s'han dut a terme accions de promoció per incorporar al Departament estudiants de màster i doctorat, i s'ha mantingut el nombre de tesis llegendes.

Tota aquesta activitat es veu reflectida en el Pacte de Dedicació. L'activitat dels membres del Departament que fan el Pacte és molt elevada en tots els àmbits. Destaquem que el 100% dels membres del Departament compleixen el Pacte de Dedicació. La mitjana de les UAA totals és de 18,79 en el curs 2012-13, que són les últimes dades a les quals tenim accés. La dedicació del PDI destaca clarament en activitats d'investigació o creació, superant la mitjana d'11 UAA.

### **2.2 Comunicació i relacions externes. Convenis més importants**

El Departament té una clara vocació internacionalitzadora que es reflecteix en el gran nombre de col·laboracions internacionals pel que fa a recerca, les quals es tradueixen en nombroses publicacions conjuntes. Els grups de recerca potencien la mobilitat entre els seus investigadors en formació, tal com es veu en l'elevat percentatge de tesis amb Menció Europea.

Així mateix, el Departament acull col·laboradors estrangers en estades de recerca, tant d'investigadors en formació com d'experts consolidats. D'altra banda, s'han mantingut les relacions amb l'ICIQ pel que fa a recerca i temes docents.

### **3. Activitats de formació de 3r cicle i formació permanent**

#### **3.1 Programes de doctorat i activitats de formació permanent**

El Departament ha participat en:

- Programa de doctorat Ciència i Tecnologia Química. Programa amb Menció de Qualitat.
- Programa de doctorat Nanociència, Materials i Enginyeria Química.

El Departament també ha participat, en col·laboració amb altres departaments de la URV, l'Institut Català d'Investigació Química (ICIQ), altres universitats i professors externs, en els màsters següents:

- Síntesi, Datàlisi i Disseny Molecular
- Arqueologia del Quaternari i Evolució Humana
- Dret ambiental
- Nanociència, Materials i Processos: Tecnologia Química de Frontera

Diversos membres del Departament també participen en activitats de formació permanent:

- Coordinació del curs de postgrau Especialista en Docència Universitària a l'EEES (Núria Ruiz)

#### **3.2 Matriculació**

Alumnes matriculats en els doctorats del Departament:

- Ciència i Tecnologia Química: 66 alumnes matriculats

#### **3.3 Beques**

*Beques de col·laboració amb Departament del MECD*

- Maria Biosca Brull

*Beques per a activitats acadèmiques dirigides de suport al professorat (antigues assistents docents)*

- Maria Biosca Brull
- Anton Cunillera Martín
- Olga Sánchez Malagón
- Irina Adell Barbarà
- Marc Medina Martínez

### **3.4 Innovació docent i noves tecnologies**

Els membres del Departament aquest curs han focalitzat els seus esforços per fer un seguiment dels punts febles que es van detectar dels cursos del grau implantats els anys anteriors i millorar-los.

## **4. Activitats de recerca i transferència**

### **4.1 Estructura personal**

El Departament de Química Física i Inorgànica està integrat per:

- Catedràtics d'universitat: 9
- Professors titulars d'universitat: 10
- Catedràtics d'escola universitària: 2
- Professors agregats: 7 (1 interí)
- Personal investigador ordinari: 1
- Personal investigador postdoctoral : 1
- Personal investigador Ramón y Cajal: 2
- Personal investigador ICREA: 2
- Personal investigador Marie Curie: 1
- Professors associats no doctors: 4
- Becaris predoctorals:
  - FPI Ministeri: 5
  - FPI Generalitat: 8
  - URV: 12
  - BRDI : 8
- Doctorands: 66
- Tècnic de gestió EMaS : 1
- Tècnics informàtics: 3
- Tècnics de laboratori: 4
- Administratius: 2
- Becaris assistents docents: 5

## 4.2 Grups i línies de recerca

### Grup d'Organometàl·lics i Catàlisi Homogènia

- Catàlisi asimètrica i nanocatàlisi
- Aplicació de tècniques combinatòries en síntesi de productes químics d'alt valor
- Catàlisi en dissolvents no convencionals
- Addició catalítica d'organoborans en síntesi orgànica

### Grup de Química Quàntica

- Estructura i reactivitat de metal·loful·lerè
- Modelització de la catàlisi homogènia
- Propietats electròniques de polioxoanions
- Modelització de la catàlisi heterogènia.
- Espectroscòpia de molècules absorbides
- Materials magnètics
- Desenvolupament de mètodes específics d'interacció de configuracions
- Mecanismes de reaccions fotoquímiques

### Grup GreenCat

- Ús de noves tecnologies, com les microones i els ultrasons, per a la preparació de materials catalítics
- Materials mesoporosos
- Síntesi de nanopartícules, metalls i òxids metàl·lics per a aplicacions catalítiques
- Transformació catalítica de glicerina en productes d'alt valor afegit
- Obtenció de CLA de la isomerització catalítica de l'àcid linoleic
- Eliminació de matèria orgànica mitjançant oxidació catalítica
- Hidrodechlorinació de compostos aromàtics, CFC i PCB
- Hidrogenació de nitrils per obtenir amines
- Eliminació catalítica de nitrats/nitrits de l'aigua

### Grup de Física i Cristal·lografia de Materials i Nanomaterials

- Dispositius fotònics. Recerca i desenvolupament
- Làser, òptica no lineal i cristalls fotònics
- Nanopartícules i materials nanoestructurats
- Materials per òptica integrada

## Grup de Microgravetat

- Creixement cristal·lí virtual en entorns de gravetat reduïda
- Anàlisi digital de senyals acceleromètrics; caracterització dels diferents entorns microgravitatoris
- Líquids bifàsics en entorns peculiars: torres de caiguda i vols parabòlics
- Determinacions ultraacurades de propietats físiques de líquids a altes temperatures

### 4.3 Centres d'innovació i participació en xarxes

Participació en la xarxa de Centres de Suport a la Innovació Tecnològica del CIDEM:

- AMIC: Aplicacions Mediambientals I Industrials de la Catàlisi
- TecaT: Centre d'Innovació Tecnològica en Desenvolupament de Catalitzadors per a Processos Sostenibles

També es participa en les xarxes següents:

- Xarxa de referència d'R+D+I en Química Teòrica i Computacional. Contracte Programa entre el Departament d'Innovació, Universitats i Empresa i la Fundació Bosch i Gimpera. Hi participen 17 grups consolidats de Catalunya.
- Xarxa temàtica Atomic Transport in Liquid Alloys and Semiconductors, ATLAS, de l'European Space Agency.

Estructures de recerca:

- Enginyeria de Materials i Micro-nano Sistemes (EMaS), format per set grups de recerca de diferents departaments de la URV.

### 4.4 Projectes i contractes actius

Tots els grups de recerca del Departament disposen del finançament del programa Suport de Grups Consolidats de la Generalitat de Catalunya. Durant el curs 2012-13 han estat vigents:

- Ajuts per a grups de recerca de qualitat Generalitat de Catalunya
- ◆ Pla de foment de la recerca (URV)
- ⊙ Projectes d'investigació d'àmbit estatal (PN I+D+N, Consolider)
- Projectes d'investigació de la Unió Europea 7M
- ☆ Accions de cooperació internacional (accions integrades, accions de cooperació, COST)
- Programa ICREA Acadèmia
- ✱ PGIR



- ★ Programes URV
- ✦ Contractes amb empreses

#### 4.4.1 Projectes amb finançament públic

□ Títol	Organometàl·lics i catàlisi homogènia
Investigador principal/grup	María del Carmen Orosia Claver Cabrero/OMICH
Organisme	AGAUR
Programa	Grups consolidats
Codi oficial	2009 SGR 116
Data d'inici	2009
Data de finalització	2013

□ Títol	Física i cristal·lografia de materials (FICMA)
Investigador principal/grup	Francisco Manuel Díaz González/FICMA-FICNA
Organisme	AGAUR
Programa	Grups consolidats
Codi oficial	2009 SGR 235
Data d'inici	2009
Data de finalització	2013

□ Títol	Química quàntica
Investigador principal/grup	Josep Maria Poblet
Organisme	AGAUR
Programa	Grups consolidats
Codi oficial	2009 SGR 462
Data d'inici	2009
Data de finalització	2013

◆ Títol	Organometàl·lics i catàlisi homogènia
Investigador principal/grup	María Del Carmen Orosia Claver Cabrero/OMICH
Organisme	URV - Universitat Rovira i Virgili
Programa	Pla de Foment de la Recerca (URV)
Codi oficial	2010PFR-URV-B2-01
Data d'inici	2010
Data de finalització	2013

◆ Títol	Química quàntica
Investigador principal/grup	Josep Maria Poblet Rius/QQ
Organisme	URV - Universitat Rovira i Virgili
Programa	Pla de Foment de la Recerca (URV)
Codi oficial	2010PFR-URV-B2-07
Data d'inici	2010
Data de finalització	2013

◆ Títol	Física i cristal·lografia de materials (FICMA)
Investigador principal/grup	Francisco Manuel Díaz González
Organisme	URV - Universitat Rovira i Virgili
Programa	Pla de Foment de la Recerca (URV)
Codi oficial	2010PFR-URV-B2-16
Data d'inici	2010
Data de finalització	2013

⊙ Títol	Modelización computacional de compuestos de interés en nanociencia y catálisis: nucleación, confinamiento y reactividad
Investigador principal/grup	Josep Maria Poblet Rius/QQ
Codi oficial	CTQ2011-29054-C02-01
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals. Investigació fonamental no orientada
Programa	Programa Nacional de Ciencias y Tecnologías Químicas
Data d'inici	01-01-2012
Data de finalització	31-12-2014

⊙ Títol	Descripción ab initio de procesos fotoinducidos en complejos de metales de transición y compuestos orgánicos
Investigador principal/grup	Cornelis de Graaf/QQ
Codi oficial	CTQ2011-23140
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals. Investigació Fonamental No Orientada
Programa	Programa Nacional de Ciencias y Tecnologías Químicas
Data d'inici	01-01-2012
Data de finalització	31-12-2014

⊙ Títol	Nuevos láseres IR ultrarrápidos y de alta potencia
Investigador principal/grup	Magdalena Aguiló Díaz/FICNA
Codi oficial	MAT2011-29255-C02-02
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals. Investigació fonamental no orientada
Programa	Programa Nacional de Ciencia y Tecnología de Materiales
Data d'inici	01-01-2012
Data de finalització	31-12-2014

⊙ Títol	Nueva estrategia para la obtención catalítica de 1,3 propanodiol a partir de glicerina. Aplicación de la tecnología microondas en la preparación de catalizadores y en reacción (CATMWPDOGLI)
Investigador principal/grup	María Pilar Salagre Carnero
Codi oficial	CTQ2011-24610
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals. Investigació fonamental no orientada
Programa	Programa Nacional de Ciencias y Tecnologías Químicas
Data d'inici	01-01-2012
Data de finalització	31-12-2014

⊙ Títol	Computational Modeling of Compounds of Interest in Nanoscience and Catalysis: Nucleation, Containment and Reactivity
Investigador principal/grup	Carles Bo Jané
Codi oficial	CTQ2011-29054-C02-02
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals. Investigació fonamental no orientada
Programa	Programa Nacional de Ciencias y Tecnologías Químicas
Data d'inici	01-01-2012
Data de finalització	31-12-2014
⊙ Títol	Cooperación Internacional en Química. Explorando y controlando la reactividad de Endofulerenos
Investigador principal/grup	Josep Maria Poblet Rius
Codi oficial	PRI-PIBUS-2011-0995
Convocatòria	Programa Nacional d'Internacionalització de l'R+D. Subprograma de Projectes Internacionals. Modalitat B. Projectes d'investigació bilaterals. Estats Units: NSF
Programa	Área Temática de Investigación Química Básica (CTQ-BQU)
Data d'inici	01-01-2012
Data de finalització	30-11-2014
⊙ Títol	Desarrollo de un nuevo láser de tulio con emisión a 1,98 micras para aplicaciones médico-quirúrgicas.
Investigador principal/grup	Francesc Díaz González
Codi oficial	PI09/90527
Convocatòria	Proyectos de Investigación en Salud
Programa	Subprograma de Proyectos de Investigación en Evaluación de tecnologías sanitarias y servicios de salud
Data d'inici	
Data de finalització	
⊙ Títol	Dispositivos de fotónica integrada basados en cristales dieléctricos. DISFOTINT
Investigador principal/grup	Francesc Díaz González
Codi oficial	TEC2010-21574-C02-02
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals. Investigació fonamental no orientada
Programa	Programa Nacional de Tecnologías Electrónicas y de Comunicaciones
Data d'inici	01-01-2011
Data de finalització	31-12-2013
⊙ Títol	Hacia una catálisis asimétrica sostenible: de la catálisis homogénea a la nanocatálisis (TASC)
Investigador principal/grup	Carmen Claver
Codi oficial	CTQ2010-14938+C23
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	
Data d'inici	01-01-2011
Data de finalització	31-12-2013

⊙ Títol	Desarrollo sostenible de catalizadores metálicos quirales inteligentes para procesos de interés industrial (SMARTCAT)
Investigador principal/grup	Montserrat Diéguez
Codi oficial	CTQ2010-15835
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	
Data d'inici	01-01-2011
Data de finalització	31-12-2013
⊙ Títol	Desarrollo de la química catalítica organoborada selectiva mediante metales de transición económicamente viables
Investigador principal/grup	Elena Fernández
Codi oficial	CTQ2010-16226
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	
Data d'inici	01-01-2011
Data de finalització	31-12-2013
⊙ Títol	Usos y valorización del dióxido de carbono
Investigador principal/grup	Anna Maria Masdeu
Codi oficial	CTQ2010-16676
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	
Data d'inici	01-01-2011
Data de finalització	31-12-2013

○ Títol	Innovative Synthesis in Continuous-Flow Processes for Sustainable Chemical Production
Participació/grup	Claver Cabrero, María del Carmen Orosia/OMICH
Organisme	Unió Europea
Programa	FP7 - Cooperation - Nanosciences, Nanotechnologies, Materials and new Production Technologies
Codi oficial	FP7-NMP-2009-LARGE-3
Data d'inici	01-09-2010
Anys de durada	31-08-2014

○ Títol	Influence of diffusive and convective mass transport on microstructure formation in Al-based alloys
Investigador principal/grup	José Javier Ruiz Martí/MG
Organisme	ESTE - European Space Research & Technology Centre
Programa	ESAP - ESA Programme Board for Human Spaceflight, Microgravity and Exploration
Codi oficial	RNF2010C, HSF-US/2010-042
Data d'inici	01-06-2010
Data de finalització	31-12-2013
○ Títol	Japanese-European De-Icing Aircraft Collaborative Exploration (JEDI ACE)
Investigador principal/grup	Francesc Díaz González
Organisme	Unió Europea

Programa	FP7
Codi oficial	314335
Data d'inici	01-11-2012
Data de finalització	30-04-2016
○ Títol	Small debris removal by laser illumination and complementary technologies
Investigador principal/Grup	Francesc Díaz González
Organisme	Unió Europea
Programa	FP7 - SPACE
Codi oficial	FP7-SPACE-2010-1-GA-263044
Data d'inici	01-06-2011
Data de finalització	31-05-2014
○ Títol	Eco-friendly biorefinery fine chemicals from CO <sub>2</sub> photo-catalytic reduction
Investigador principal/grup	María del Carmen Claver
Organisme	Unió Europea
Programa	FP7 – NMP-2012-SMALL-6
Codi oficial	
Data d'inici	
Data de finalització	
○ Títol	SERS ultrasensitive universal sensing of proteins through cross-reactive sensor prove
Investigador principal/grup	Ramon Angel Alvarez Puebla
Organisme	Unió Europea
Programa	FP7 – PEOPLE-2012-IEF
Codi oficial	329131
Data d'inici	
Data de finalització	
○ Títol	Prion detection through organized arrays of gold nanorods as SERS substrates
Investigador principal/grup	Ramon Angel Alvarez Puebla
Organisme	Unió Europea
Programa	FP7 – PEOPLE-2013-IEF
Codi oficial	623527
Data d'inici	
Data de finalització	
★ Títol	European F-element network (EUFEN)
Investigador principal/grup	Francesc Díaz
Codi oficial	CM1006
Convocatòria	COST
Programa	
Data d'inici	01-01-2011
Data de finalització	31-12-2013
★ Títol	Polyoxometalate Chemistry for Molecular Nanoscience (PoCheMoN)
Investigador principal/grup	Josep Maria Poblet

Codi oficial	CM1203
Convocatòria	COST
Programa	
Data d'inici	01-01-2011
Data de finalització	31-12-2013
🌀 Títol	Convergent distributed environment for computational spectroscopy (CODECS)
Investigador principal/grup	Rosa Caballol Lorenzo
Codi oficial	CM 1002
Convocatòria	COST
Programa	
Data d'inici	21-11-2010
Data de finalització	21-11-2014
🌀 Títol	Catalytic routines for small molecule activation (CARISMA)
Investigador principal/grup	Montserrat Diéguez Fernández
Codi oficial	CM1205
Convocatòria	COST
Programa	
Data d'inici	2013
Data de finalització	2017

■ Títol	Programa ICREA Acadèmia 2010.
Investigador principal/grup	Òscar Pàmies/OMICH
Organisme	Generalitat
Programa	Intensificació de la Recerca
Codi oficial	2010ICREA-01
Data d'inici	01-01-2011
Data de finalització	31-12-2015
■ Títol	Programa ICREA Acadèmia 2010.
Investigador principal/grup	Francesc Díaz González
Organisme	Generalitat
Programa	Intensificació de la Recerca
Codi oficial	2010ICREA-02
Data d'inici	01-01-2011
Data de finalització	31-12-2015
■ Títol	Programa ICREA Acadèmia 2009.
Investigador principal/grup	Montserrat Diéguez
Organisme	Generalitat
Programa	Intensificació de la Recerca
Codi oficial	2009ICREA-01
Data d'inici	01-01-2010
Data de finalització	31-12-2014

#### 4.4.2 Contractes amb empreses

✦ Títol	Relleno de pvc en torre de refrigeración. Evaluación de propiedades actuales y propuestas de actuación
Investigador principal/grup	F. Díaz/FICMA-FICNA
Codi oficial	TQC12033S
Data d'inici	2012
Data de finalització	2013
✦ Títol	Desenvolupament programa educatiu per a centres escolars Aula Port Aventura
Investigador principal/grup	F. Díaz/FICMA-FICNA
Codi oficial	F11120N
Data d'inici	2012
Data de finalització	2013

n Títol	Estudi de l'anàlisi de mostres per a SCA Hygiene Products
Investigador principal/grup	F. Díaz/FICMA-FICNA
Codi oficial	TQC13006S
Data d'inici	2012
Data de finalització	2013

✦ Títol	Identificació d'oli sobre mostra de paper SCA, Hygiene Products
Investigador principal/grup	F. Díaz/FICMA-FICNA
Codi oficial	TQC13019S
Data d'inici	2012
Data de finalització	2013

✦ Títol	Determinacion del grado de llenado de contenedores
Investigador principal/grup	F. Díaz/FICMA-FICNA
Codi oficial	T12130S
Data d'inici	2012
Data de finalització	2013
✦ Títol	Correlación valores de difusión-propiedades mecánicas en diferentes morteros
Investigador principal/grup	F. Díaz/FICMA-FICNA
Codi oficial	T12133S
Data d'inici	2012
Data de finalització	2013

✦ Títol	Synthesis, characterization and catalytic tests of water-soluble metal nanoparticles stabilized
Investigador principal/grup	C. Claver/OHMIC
Codi oficial	TQC09013S
Data d'inici	2012
Data de finalització	2013

✦ Títol	Desarrollo de catalizadores para la copolimerización $\text{CO}_2$ /epoxido
Investigador principal/grup	C. Claver/OMICH
Codi oficial	TQC12021S
Data d'inici	2012
Data de finalització	2013
n Títol	ADDENDA Telomerization of isoprene
Investigador principal/grup	C. Claver/OMICH
Codi oficial	TQC13016S
Data d'inici	2012
Data de finalització	2013
✦ Títol	Desarrollo de diferentes grados de polipropilencarbonato y optimización de catalizadores novedosos para su obtención
Investigador principal/grup	C. Claver/OMICH
Codi oficial	TQC13024S
Data d'inici	
Data de finalització	

#### 4.5 Col·laboracions internacionals

Institut Charles Gerhardt-CTMM- Universitat de Montpellier 2 -CNRS, Montpellier (França)

Universitat P. Sabatier, Tolosa (França)

Institut Néel – CNRS, Grenoble (França)

Laboratori de Materials Inorgànics Universitat Blaise Pascal. Clermont-Ferrand (França)

Universitat Louis Pasteur Estrasburg (França)

Universitat Claude Bernard, Lió (França)

Universitat dels Studi di Milano-Bicocca (Itàlia)

Universitat dels Studi di Genova (Itàlia)

Departament Científic i Tecnològic, Universitat de Verona (Itàlia)

Universitat de Trieste (Itàlia)

Centre Nano-SISTEMI, Alessandria (Itàlia)

Imperial College, Londres (Regne Unit)

Dyson Perry Labs. Oxford (Regne Unit)

Materials and engineering research, Universitat de Sheffield Hallam, Sheffield (Regne Unit)

Universitat de Durham (Regne Unit)

Universitat de Glasgow (Regne Unit)



Universitat of Califòrnia, Davis (EUA)  
Universitat de l'Estat de Florida (EUA)  
Universitat Estatal de Nova York a Stony Brook (EUA)  
Universitat de Clemson (EUA)  
Institut Max Born, Berlín (Alemanya)  
Universitat de Würzburg, Würzburg (Alemanya)  
Universitat de Bielefeld (Alemanya)  
Universitat Jacobs de Bremen (Alemanya)  
Universitat RWTH Aachen (Alemanya)  
Laboratori de Fotònica Avançada, Institut d'Imatge i Òptica Aplicades, Escola Politécnica Federal, Lausana (Suïssa)  
Laser physics, KTH – Institut Reial de Tecnologia d'Estocolm (Suècia)  
Acadèmia Polonesa de les Ciències, Wroclaw (Polònia)  
Universitat de Queen (Canadà)  
Universitat de Mount Alison (Canadà)  
Universitat de Sherbrooke (Canadà)  
UNAM (Mèxic)  
Universitat College Dublín (Irlanda)  
Universitat de Corcaigh – Institut Nacional de Tyndall (Irlanda)  
Universitat de Graz (Àustria)  
Acadèmia de les Ciències (Rússia)  
Universitat Abdelmalek Esaadi Tetuan (Marroc)  
Universitat de Concepción (Xile)  
Universitat Tècnica d'Eindhoven (Holanda)  
Universitat de Southampton (Regne Unit)  
Universitat d'Anjou)  
Laboratori de Materials i Catàlisi, Universitat Djillali Liabes (Algèria)

#### **4.6 Outputs recerca i transferència: tesis, publicacions, congressos, etc.**

S'ha publicat, durant l'any 2013, 86 publicacions (articles, revisions i capítols de llibre en l'àmbit internacional), 79 de les quals en revistes indexades en SCI, i s'han presentat un gran nombre de comunicacions a congressos nacionals i internacionals.

#### 4.6.1 Publicacions en revistes internacionals

Diode-pumped continuous-wave laser operation of co-doped (Ho,Tm): KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> monoclinic crystal

Jambunathan, V; Mateos, X; Pujol, MC; Carvajal, JJ; Griebner, U; Petrov, V; Aguiló, M; Díaz, F

OPTICS AND LASER TECHNOLOGY, 54, 326-328, 2013

Ultrafast Deactivation Mechanism of the Excited Singlet in the Light-Induced Spin Crossover of [Fe(2,2'-bipyridine)<sub>3</sub>]<sup>2+</sup>

Sousa, C; de Graaf, C; Rudavskiy, A; Broer, R; Tatchen, J; Etinski, M; Marian, CM

CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, 19, 17541-17551, 2013

H<sub>2</sub>S-Mediated Thermal and Photochemical Methane Activation

Baltrusaitis, J; de Graaf, C; Broer, R; Patterson, EV

CHEMPHYSICHEM, 14, 3960-3970, 2013

Unexpected Isomerism in cis-2 Bis(pyrrolidino)[60]Fullerene Diastereomers

Izquierdo, M; Cerón, MR; Alegret, N; Metta-Magana, AJ; Rodríguez-Forteza, A; Poblet, JM; Echegoyen, L

ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION, 52, 12928-12931, 2013

Second-Generation Amino Acid Furanoside Based Ligands from D-Glucose for the Asymmetric Transfer Hydrogenation of Ketones

Coll, M; Pàmies, O; Adolfsson, H; Diéguez, M

CHEMCATCHEM, 5, 3821-3828, 2013

Optimization of dopant concentration in Ho:KLu (WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> laser achieving similar to 70% slope efficiency

Jambunathan, V; Mateos, X; Pujol, MC; Carvajal, JJ; Aguiló, M; Díaz, F; Griebner, U; Petrov, V

LASER PHYSICS, 23, -, 2013

An Unstable Paramagnetic Isopolyoxomolybdate Intermediate Non-Homogeneously Reduced at Different Sites and Trapped in a Host Based on Chemical Adaptability

Merca, A; Garai, S; Bogge, H; Haupt, ETK; Ghosh, A; López, X; Poblet, JM; Averseng, F; Che, M; Muller, A

ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION, 52, 11765-11769, 2013

Ar<sup>+</sup> ion milling rib waveguides on nonlinear optical (Yb,Nb):RTP/RTP epitaxial layers

Cugat, J; Choudhary, A; Solé, R; Massons, J; Shepherd, D; Díaz, F; Aguiló, M

OPTICAL MATERIALS EXPRESS, 3, 1912-1917, 2013

Metal-free borylative ring-opening of vinyl epoxides and aziridines

Sanz, X; Lee, GM; Pubill-Ulldemolins, C; Bonet, A; Gulyas, H; Westcott, SA; Bo, C; Fernández, E

ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY, 11, 7004-7010, 2013

Alkoxide Activation of Aminoboranes towards Selective Amination

Sole, C; Fernandez, E

ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION, 52, 11351-11355, 2013

Pd-catalysed asymmetric Suzuki-Miyaura reactions using chiral mono- and bidentate phosphorus ligands

Castillo, AB; Perandones, BF; Zangrando, E; Gladioli, S; Godard, C; Claver, C

JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, 743, 31-36, 2013

Bingel-Hirsch Addition on Non-Isolated-Pentagon-Rule Gd<sub>3</sub>N@C-2n, (2n=82 and 84) Metallofullerenes: Products under Kinetic Control

Alegret, N; Salvadó, P; Rodríguez-Forteza, A; Poblet, JM

JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY, 78, 9986-9990, 2013

A Selective Transformation of Enals into Chiral gamma-Amino Alcohols

Calow, ADJ; Batsanov, AS; Pujol, A; Solé, C; Fernández, E; Whiting, A

ORGANIC LETTERS, 15, 4810-4813, 2013

Optical spectroscopy of Tm<sup>3+</sup> : YAG transparent ceramics

Thomas, JT; Tonelli, M; Veronesi, S; Cavalli, E; Mateos, X; Petrov, V; Griebner, U; Li, J; Pan, YB; Guo, JK

JOURNAL OF PHYSICS D-APPLIED PHYSICS, 46, -, 2013

A Phosphite-Pyridine/Iridium Complex Library as Highly Selective Catalysts for the Hydrogenation of Minimally Functionalized Olefins

Mazuela, J; Pàmies, O; Diéguez, M

ADVANCED SYNTHESIS & CATALYSIS, 355, 2569-2583, 2013

Application of pyranoside phosphite-pyridine ligands to enantioselective metal-catalyzed allylic substitutions and conjugate 1,4-additions

Lega, M; Margalef, J; Ruffo, F; Pàmies, O; Diéguez, M

TETRAHEDRON-ASYMMETRY, 24, 995-1000, 2013

New microarchitectures of (Er,Yb):Lu<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanocrystals embedded in PMMA: synthesis, structural characterization, and luminescent properties

Galceran, M; Pujol, MC; Carvajal, JJ; Mateos, X; Formentin, P; Pallarès, J; Marsal, LF; Park, KH; Rotermund, F; Kim, K; Aguiló, M; Díaz, F

NANOSCALE RESEARCH LETTERS, 8, -, 2013

Polyoxometalate {W<sub>18</sub>O<sub>56</sub>XO<sub>6</sub>} Clusters with Embedded Redox-Active Main-Group Templates as Localized Inner-Cluster Radicals

Vila-Nadal, L; Peuntinger, K; Busche, C; Yan, J; Luders, D; Long, DL; Poblet, JM; Guldi, DM; Cronin, L

ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION, 52, 9695-9699, 2013

Fabrication of p-type porous GaN on silicon and epitaxial GaN

Bilousov, OV; Geaney, H; Carvajal, JJ; Zubialevich, VZ; Parbrook, PJ; Giguere, A; Drouin, D; Díaz, F; Aguiló, M; O'Dwyer, C

APPLIED PHYSICS LETTERS, 103, -, 2013

Novel Polymer Stabilized Water Soluble Ru-Nanoparticles as Aqueous Colloidal Fischer-Tropsch Catalysts

Gual, A; Delgado, JA; Godard, C; Castellón, S; Curulla-Ferré, D; Claver, C

TOPICS IN CATALYSIS, 56, 1208-1219, 2013

Base-Free beta-Boration of alpha,beta-Unsaturated Imines Catalysed by Cu<sub>2</sub>O with Concurrent Enhancement of Asymmetric Induction

Calow, ADJ; Solé, C; Whiting, A; Fernández, E

CHEMCATCHEM, 5, 2233-2239, 2013

Expanded Scope of the Asymmetric Hydrogenation of Minimally Functionalized Olefins Catalyzed by Iridium Complexes with Phosphite-Thiazoline Ligands

Mazuela, J; Pàmies, O; Diéguez, M

CHEMCATCHEM, 5, 2410-2417, 2013

Fast aging treatment for the synthesis of hydrocalumites using microwaves

Pérez-Barrado, E; Pujol, MC; Aguiló, M; Cesteros, Y; Díaz, F; Pallarès, J; Marsal, LF; Salagre, P

APPLIED CLAY SCIENCE, 0, 313-319, 2013

Mn(III) complexes with tridentate N,N,O-ligands as catalysts for the epoxidation of alkenes

Aghmiz, A; Mostfa, N; Iksi, S; Rivas, R; González, MD; Díaz, Y; El Guemmout, F; El Laghdach, A; Echarri, R; Masdeu-Bultó, AM

JOURNAL OF COORDINATION CHEMISTRY, 66, 2567-2577, 2013

Theoretical and experimental study of the interaction of CO on TiC surfaces: Regular versus low coordinated sites

Mant, BP; Asara, GG; Anderson, JA; Homs, N; de la Piscina, PR; Rodríguez, S; Ricart, JM; Illas, F

SURFACE SCIENCE, 613, 63-73, 2013

Endohedral Metallofullerenes Containing Lanthanides: A Robust Yet Simple Computational Approach

Aparicio-Anglès, X; Alegret, N; Clotet, A; Rodríguez-Forteza, A; Poblet, JM

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, 117, 12916-12921, 2013

Sulfonic acid-functionalized aerogels as high resistant to deactivation catalysts for the etherification of glycerol with isobutene

González, MD; Salagre, P; Taboada, E; Llorca, J; Molins, E; Cesteros, Y

APPLIED CATALYSIS B-ENVIRONMENTAL, 136, 287-293, 2013

Phosphite-Thiazoline versus Phosphite-Oxazoline for Pd-Catalyzed Allylic Substitution Reactions: A Case for Comparison

Mazuela, J; Pàmies, O; Diéguez, M

CHEMCATCHEM, 5, 1504-1516, 2013

Evaluation of hectorites, synthesized in different conditions, as soot combustion catalysts after impregnation with copper

Sánchez, T; Gebretsadik, FB; Salagre, P; Cesteros, Y; Guillen-Hurtado, N; García-García, A; Bueno-Lopez, A

APPLIED CLAY SCIENCE, 0, 40-45, 2013

Europium doping in KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>

Pujol, MC; Carvajal, JJ; Mateos, X; Solé, R; Massons, J; Aguiló, M; Díaz, F

JOURNAL OF LUMINESCENCE, 138, 77-82, 2013

Redox-Active Behavior of the  $[\{\text{Ti}(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_5)(\mu\text{-NH})\}_3(\mu_3\text{-N})]$  Metalloligand

Caballo, J; Carbó, JJ; Mena, M; Pérez-Redondo, A; Poblet, JM; Yelamos, C

INORGANIC CHEMISTRY, 52, 6103-6109, 2013

Cobalt Polyoxometalates as Heterogeneous Water Oxidation Catalysts

Soriano-López, J; Goberna-Ferrón, S; Vígara, L; Carbó, JJ; Poblet, JM; Galán-Mascarós, JR

INORGANIC CHEMISTRY, 52, 4753-4755, 2013

Building Functionality through Sequential CB and CF Bond Formation

Palau-Lluch, G; Fernández, E

ADVANCED SYNTHESIS & CATALYSIS, 355, 1464-1470, 2013

Fe-Catalyzed Olefin Epoxidation with Tridentate Non-Heme Ligands and Hydrogen Peroxide as the Oxidant

Perandones, BF; Nieto, ED; Godard, C; Castellón, S; de Frutos, P; Claver, C

CHEMCATCHEM, 5, 1092-1095, 2013

Ultrasounds and microwave-assisted synthesis of mesoporous hectorites

Sánchez, T; Salagre, P; Cesteros, Y

MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS, 171, 24-34, 2013

Single-mode rib waveguides in (Yb,Nb) : RbTiOPO<sub>4</sub> by reactive ion etching

Choudhary, A; Cugat, J; Pradeesh, K; Solé, R; Díaz, F; Aguiló, M; Chong, HMM; Shepherd, DP

JOURNAL OF PHYSICS D-APPLIED PHYSICS, 46, -, 2013

Rhodium asymmetric hydroformylation of cyclic alkenes

Claver, C; Castellón, S; Godard, C; Pernadones, BF

ABSTRACTS OF PAPERS OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, 245, -, 2013

Phospite-pyridine ligands for asymmetric palladium catalyzed allylic substitution reactions

Diéguez, M; Mazuela, J; Pàmies, O

ABSTRACTS OF PAPERS OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, 245, -, 2013

Enantioselective Ir-Catalyzed Hydrogenation of Minimally Functionalized Olefins Using Pyranoside Phosphinite-Oxazoline Ligands

Mazuela, J; Pàmies, O; Diéguez, M

EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY, -, 2139-2145, 2013

Bingel-Hirsch Addition on Endohedral Metallofullerenes: Kinetic Versus Thermodynamic Control

Alegret, N; Rodríguez-Forteza, A; Poblet, JM

CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, 19, 5061-5069, 2013

Tungsten Redox Waves in [XMW<sub>11</sub>O<sub>40</sub>]<sup>(n-)</sup> (X = P, Si, Al and M = W, Mo, V, Nb, Ti) Keggin Compounds - Effect of Localised/Delocalised Charges

Aparicio, PA; Poblet, JM; López, X

EUROPEAN JOURNAL OF INORGANIC CHEMISTRY, -, 1910-1916, 2013

Waveguide laser modelling of Erbium/Ytterbium activated monoclinic double tungstates

de Mendivil, JM; Lifante, G; Berrospe, C; Bolanos, W; Carvajal, JJ; Mateos, X; Aguiló, M; Díaz, F; Cantelar, E

OPTICAL AND QUANTUM ELECTRONICS, 45, 349-356, 2013

Effect of the La(OH)<sub>3</sub> preparation method on the surface and rehydroxylation properties of resulting La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles

Méndez, M; Carvajal, JJ; Marsal, LF; Salagre, P; Aguiló, M; Díaz, F; Formentin, P; Pallarès, J; Cesteros, Y

JOURNAL OF NANOPARTICLE RESEARCH, 15, -, 2013

Magnetic phase transition in KGd(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> double tungstate

Borowiec, MT; Zayarnyuk, T; Gutowska, MU; Wieckowski, J; Szweczyk, A; Dyakonov, V; Zubov, E; Baranski, M; Domukhovski, V; Pujol, MC; Aguiló, M; Díaz, F; Szymczak, H

CENTRAL EUROPEAN JOURNAL OF PHYSICS, 11, 394-396, 2013

Relevance of Thermal Effects in the Formation of Endohedral Metallofullerenes: The Case of Gd<sub>3</sub>N@C-s(39663)-C-82 and Other Related Systems

Mulet-Gas, M; Rodríguez-Forteza, A; Echegoyen, L; Poblet, JM

INORGANIC CHEMISTRY, 52, 1954-1959, 2013



A New Modular Phosphite-Pyridine Ligand Library for Asymmetric Pd-Catalyzed Allylic Substitution Reactions: A Study of the Key Pd- $\pi$ -Allyl Intermediates

Mazuela, J; Pàmies, O; Diéguez, M

CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, 19, 2416-2432, 2013

Channel waveguides on RbTiOPO<sub>4</sub> by Cs<sup>+</sup> ion exchange

Cugat, J; Solé, R; Carvajal, JJ; Mateos, X; Massons, J; Lifante, G; Díaz, F; Aguiló, M

OPTICS LETTERS, 38, 323-325, 2013

Femtosecond-Laser Microstructuring of Ribs on Active (Yb,Nb):RTP/RTP Planar Waveguides

Cugat, J; de la Cruz, AR; Solé, R; Ferrer, A; Carvajal, JJ; Mateos, X; Massons, J; Solís, J; Lifante, G; Díaz, F; Aguiló, M

JOURNAL OF LIGHTWAVE TECHNOLOGY, 31, 385-390, 2013

Establishing the role of Bronsted acidity and porosity for the catalytic etherification of glycerol with tert-butanol by modifying zeolites

González, MD; Cesteros, Y; Salagre, P

APPLIED CATALYSIS A-GENERAL, 450, 178-188, 2013

Conjugate Addition of Organoaluminum Species to Michael Acceptors and Related Processes

Pàmies, O; Diéguez, M

MODERN ORGANOALUMINUM REAGENTS: PREPARATION, STRUCTURE, REACTIVITY AND USE, 41, 277-306, 2013

Low resistivity electrical contacting of porous n-type GaN layers due to reduced workfunction intermetallic seed layers

Bilousov, OV; Carvajal, JJ; O'Dwyer, C; Mateos, X; Díaz, F; Aguiló, M

GALLIUM NITRIDE MATERIALS AND DEVICES VIII, 8625, -, 201

Factors affecting the magnetic coupling in Sr<sub>2</sub>V<sub>3</sub>O<sub>9</sub> type oxides: As for V substitution in the VO<sub>4</sub> tetrahedra and nature of the cation

Rodríguez-Fortea, A; Lluell, M; Alemany, P; Canadell, E

DALTON TRANSACTIONS, 42, 15555-15558, 2013

Theoretical determination of spin Hamiltonians with isotropic and anisotropic magnetic interactions in transition metal and lanthanide complexes

Maurice, R; de Graaf, C; Guihery, N

PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 15, 18784-18804, 2013

Explanation of the site-specific spin crossover in Fe(mtz)(6)(BF<sub>4</sub>)(2)

Rudavskiy, A; Havenith, RWA; Broer, R; de Graaf, C; Sousa, C

DALTON TRANSACTIONS, 42, 14702-14709, 2013

Ligand effect in the Rh-NP catalysed partial hydrogenation of substituted arenes

Castelbou, JL; Gual, A; Mercadé, E; Claver, C; Godard, C

CATALYSIS SCIENCE & TECHNOLOGY, 3, 2828-2833, 2013

Ti<sub>2</sub>S@D-3h(24109)-C-78: a sulfide cluster metallofullerene containing only transition metals inside the cage

Li, FF; Chen, N; Mulet-Gas, M; Triana, V; Murillo, J; Rodríguez-Forteza, A; Poblet, JM; Echegoyen, L

CHEMICAL SCIENCE, 4, 3404-3410, 2013

Microwave-assisted synthesis of sulfonic acid-functionalized microporous materials for the catalytic etherification of glycerol with isobutene

González, MD; Salagre, P; Taboada, E; Llorca, J; Cesteros, Y

GREEN CHEMISTRY, 15, 2230-2239, 2013

(Ho, Tm, Yb): KLuW nanoparticles, an efficient thermometry sensor in the biological range

Savchuk, OA; Carvajal, JJ; Barrera, EW; Pujol, MC; Mateos, X; Solé, R; Massons, J; Aguiló, M; Díaz, F

NANOSCALE IMAGING, SENSING, AND ACTUATION FOR BIOMEDICAL APPLICATIONS X, 8594, -, 2013

2  $\mu$  m waveguide lasers in monoclinic potassium double tungstates

Carvajal, JJ; Berrospe, CJ; Mateos, X; Aguiló, M; Díaz, F

SOLID STATE LASERS XXII: TECHNOLOGY AND DEVICES, 8599, -, 2013

Impact of short and long-range effects on the magnetic interactions in neutral organic radical-based materials

Domingo, A; Verot, M; Mota, F; de Graaf, C; Novoa, JJ; Robert, V

PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 15, 6982-6989, 2013

Spectroscopic characterization of sol-gel synthesized Tm:Lu<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanocrystals (vol .106, p. 409, 2012)

Barrera, EW; Pujol, MC; Cascales, C; Zaldo, C; Park, KH; Choi, SB; Rotermund, F; Carvajal, JJ; Mateos, X; Aguiló, M; Díaz, F

APPLIED PHYSICS B-LASERS AND OPTICS, 110, 131-131, 2013

Theoretical Investigation of the Electronic Structure of Fe(II) Complexes at Spin-State Transitions

Papai, M; Vanko, G; de Graaf, C; Rozgonyi, T

JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION, 9, 509-519, 2013

Formation of Heterofullerenes by Direct Exposure of C-60 to Boron Vapor

Dunk, PW; Rodríguez-Fortea, A; Kaiser, NK; Shinohara, H; Poblet, JM; Kroto, HW

ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION, 52, 315-319, 2013

Upconversion emission of LiNdP<sub>4</sub>O<sub>12</sub> and KNdP<sub>4</sub>O<sub>12</sub> crystals

Marciniak, L; Streck, W; Bednarkiewicz, A; Hreniak, D; Pujol, MC; Díaz, F

JOURNAL OF LUMINESCENCE, 133, 57-60, 2013

A Modular Furanoside Thioether-Phosphite/Phosphinite/Phosphine Ligand Library for Asymmetric Iridium-Catalyzed Hydrogenation of Minimally Functionalized Olefins: Scope and Limitations

Coll, M; Pàmies, O; Diéguez, M

ADVANCED SYNTHESIS & CATALYSIS, 355, 143-160, 2013

Origin of the Magnetic Anisotropy in Heptacoordinate Ni-II and Co-II Complexes

Ruamps, R; Batchelor, LJ; Maurice, R; Gogoi, N; Jiménez-Lozano, P; Guihery, N; de Graaf, C; Barra, AL; Sutter, JP; Mallah, T

CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL, 19, 950-956, 2013

Rhodium-NHC complexes mediate diboration versus dehydrogenative borylation of cyclic olefins: a theoretical explanation

Pubill-Ulldemolins, C; Poyatos, M; Bo, C; Fernández, E

DALTON TRANSACTIONS, 42, 746-752, 2013

Sc<sub>2</sub>S@C-2(7892)-C-70: a metallic sulfide cluster inside a non-IPR C-70 cage

Chen, N; Mulet-Gas, M; Li, YY; Stene, RE; Atherton, CW; Rodríguez-Forteza, A; Poblet, JM; Echegoyen, L

CHEMICAL SCIENCE, 4, 180-186, 2013

On the accuracy of the interdiffusion coefficient measurements of high-temperature binary mixtures under ISS conditions

Saez, N; Ruiz, Xr; Pallarès, J; et al.

COMPTES RENDUS MECANIQUE, 341, 405-416, 2013

Plasmonic Nanoprobes for Real-Time Optical Monitoring of Nitric Oxide inside Living Cells

Gil Rivera, P; Vázquez-Vázquez, C; Giannini, V; Callao, MP; Parak, WJ; Correa-Duarte, MA; Álvarez-Puebla, RA

ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION, 2013, 52, 13694-13698

Nanoreactors for Simultaneous Remote Thermal Activation and Optical Monitoring of Chemical Reactions

Vázquez-Vázquez, C; Vaz, B; Giannini, V; Pérez-Lorenzo, M; Álvarez-Puebla, RA; Correa-Duarte, MA

JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, 2013, 135, 13616-13619

Plasmonic Mesoporous Composites as Molecular Sieves for SERS Detection

López-Puente, V; Abalde-Cela, S; Angelome, PC; Álvarez-Puebla, RA; Liz-Marzán, LM

JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS, 2013, 4, 2715-2720

Highly Sensitive SERS Quantification of the Oncogenic Protein c-Jun in Cellular Extracts

Guerrini, L; Pazos, E; Penas, C; Vázquez, EM; Mascarenas, JL; Álvarez-Puebla, RA  
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, 2013, 135, 10314-10317

Self-Assembly of Au@Ag Nanorods Mediated by Gemini Surfactants for Highly Efficient SERS-Active Supercrystals

Gómez-Grana, S; Pérez-Juste, J; Álvarez-Puebla, RA; Guerrero-Martínez, A; Liz-Marzán, LM  
ADVANCED OPTICAL MATERIALS, 2013, 1, 477-481

Analysis of the SERS Spectrum by Theoretical Methodology: Evaluating a Classical Dipole Model and the Detuning of the Excitation Frequency

Hermida-Ramón, JM; Guerrini, L; Álvarez-Puebla, RA  
JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A, 2013, 117, 4584-4590

CuTe Nanocrystals: Shape and Size Control, Plasmonic Properties, and Use as SERS Probes and Photothermal Agents

Li, W; Zamani, R; Gil Rivera, P; Pelaz, B; Ibáñez, Maria; Cadavid, D; Shavel, A; Álvarez-Puebla, RA; Parak, WJ; Arbiol, J; Cabot, A  
JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, 2013, 135, 7098-7101

Highly organized plasmonic structures for SERS sensing

Pérez Pazos, N; Tebbe, M; Mueller, M; Álvarez Puebla, RA; Fery, A  
ABSTRACTS OF PAPERS OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY, 2013, 245, -

Macroscale Plasmonic Substrates for Highly Sensitive Surface-Enhanced Raman Scattering

Alba, M; Pazos-Pérez, N; Vaz, B; Formentin, P; Tebbe, M; Correa-Duarte, MA; Granero, P; Ferré-Borrull, J; Álvarez, R; Pallarès, J; Fery, A; de Lera, AR; Marsal, LF; Álvarez-Puebla, RA  
ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION, 2013, 52, 6459-6463

Simultaneous SERS detection of copper and cobalt at ultratrace levels

Tsoutsis, D; Guerrini, L; Hermida-Ramon, JM; Giannini, V; Liz-Marzan, LM; Wei, A; Álvarez-Puebla, RA

NANOSCALE, 2013, 5, 5841-5846

The effect of the silica thickness on the enhanced emission in single particle quantum dots coated with gold nanoparticles

Castelló Serrano, I; Vázquez-Vázquez, C; Matas Adams, A; Stoica, G; Correa-Duarte, MA; Palomares, E; Álvarez-Puebla, RA.

RSC ADVANCES, 2013, 3, 10691-10695

#### **4.6.2 Congressos**

Els membres del DQFI han participat en múltiples congressos i reunions tant de caràcter nacional com internacional. A continuació, es detalla la participació en les conferències a les quals han estat invitats.

##### *4.6.2.1 Organització de congressos*

J.J. Carvajal (membre del Comitè Científic)

VIII Encuentro Franco-Español de la Química y la Física del Estado Sólido

Vila-Real (Castelló), 2-4 d'abril de 2014

M. Reguero (membre del Comitè Organitzador)

Convergent Distributed environment For Computational Spectroscopy (CODECS) 2013 workshop

##### *4.6.2.2 Conferències invitades*

Ponent: J.J. Carvajal

Títol: "Upconverting nanoparticles: new nanothermometers for the biological range of temperatures"

Congrés: Workshop Biosensors for a Better Environment, Caldes de Montbui (Espanya), setembre 2013

Ponent: J.J. Carvajal, O.V. Bilousov, X. Mateos, R. Solé, J. Massons, F. Díaz, M. Aguiló

Títol: "Porous GaN grown by chemical vapour deposition"

Congrés: Journées Nationales des Cristaux pour l'Optique (JNCO 2013), Cherbourg (França), 2013

Ponent: R.A. Álvarez-Puebla

Títol: "Optical properties and applications"

Congrés: The 5th International Conference on Metamaterials, Photonic Crystals and Plasmonics (Meta14), Singapur, 2014

Ponent: R.A. Álvarez-Puebla

Títol: "Silicon Nanocavities for Mie-Assisted Raman Scattering Amplification"

Congrés: MRS Spring Meeting, San Francisco, CA, EUA, 2014

Ponent: R.A. Álvarez-Puebla

Títol: "Real time detection and diagnostics using plasmonic particles"

Congrés: 247th ACS National Meeting & Exposition, Dallas, TX, EUA, 2014

Ponent: R.A. Álvarez-Puebla

Títol: "Real time diagnostics of infectious diseases"

Congrés: SPIE Photonics West, San Francisco, CA, EUA, 2014

Ponent: R.A. Álvarez-Puebla

Títol: "Plasmons in chemical biology"

Congrés: Universitat Jaume I, Castelló, 2013

Ponent: R.A. Álvarez-Puebla

Títol: "Plasmon for fast diagnosis"

Congrés: UOF Meeting, Bali, Malàisia, 2013

Ponent: R.A. Álvarez-Puebla

Títol: "Synthesis and applications of plasmonic particles"

Congrés: EMN East Meeting, Pequín, Xina, 2013

Ponent: R.A. Álvarez-Puebla

Títol: "Plasmonic particles in nanomedicine"

Congrés: ICMAB, Barcelona, 2013

Ponent: R.A. Álvarez-Puebla

Títol: "Optical biosensing with plasmonic particles"

Congrés: International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT 2013) Singapur, 2013

Ponent: Montserrat Diéguez

Títol: "Development of new hybrid P,S-ligands for asymmetric Ir-catalyzed hydrogenation of minimally functionalized olefins"

Congrés: Zing Conferences, Nerja (Málaga), febrer 2014

Ponent: Òscar Pàmies

Títol: "Development of hybrid thiazoline-based ligands for the metal-catalyzed asymmetric catalysis"

Congrés: Zing Conferences, Nerja (Málaga), febrer 2014

Ponent: Carmen Claver

Títol: "Catalysis for Sustainable Development: From Ligands Design to Metal Nanoparticles"

Congrés: I Escuela Internacional de Catálisis. VIII Simposio Colombiano de Catálisis VI Simposio de Química Aplicada, Armenia, Colòmbia, setembre 2013

Ponent: Cyril Godard

Títol: "Soluble metal nanoparticles stabilized by P-ligands: Synthesis, characterization and application in selective hydrogenation reactions"

Congrés: XXXIV Reunión Bienal de la Sociedad Española de Química, Santander, setembre 2013

Ponent: Carmen Claver

Títol: "20 años de Catálisis Europea...y más allá"

Congrés: XXXIV Reunión Bienal de la Sociedad Española de Química, Santander, setembre 2013



Ponent: Carmen Claver

Titol: "Alternative Pd catalysts for Sustainable Processes: Improving Pd catalysts: carbonylation and C-C bond formation"

Congres: : XIth European Congress on Catalysis, EuropaCat, Lió, França, setembre 2013

Ponent: Carmen Claver

Titol: "Asymmetric hydroformylation of heterocyclic olefins"

Congres: 20th EuCheMS Conference on Organometallic Chemistry, St Andrews, Escòcia, juliol 2013

Ponent: Elena Fernández

Titol: "Building functionality through quaternized boranes"

Congres: Johnson Matthey, Cambridge, Regne Unit, maig 2014

Ponent: Josep M. Poble

Titol: "Endohedral Metallofullerenes. A Unique Host-Guest Association"

Congres: Summer School (ICIQ); 30 juny - 4 juliol 2013

Ponent: Josep M. Poble

Titol: "Computational Modelling of Polyoxometalates"

Congres: 15th Asian Chemical Congress, 19-23 agost 2013

Ponent: Josep M. Poble

Titol: "Electronic Structure of Polyoxometalates: From Nucleation of Small Polyoxotungstates to the Properties of Large Anions"

Congres: XXXIV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química

Ponent: Josep M. Poble

Titol: "Challenges in the Computational Modelling of Polyoxometalates"

Congres: Joint Working Group Meeting 2013 of the COST action 1203 on 'Polyoxometalate Chemistry for Molecular Nanoscience'

#### 4.7 Tesis doctorals

S'han defensat 11 tesis doctorals llegides durant el període del juny del 2013 al maig del 2014, 5 de les quals amb títol Doctor Europeu. Quatre tesis s'han fet a l'ICIQ.

Doctorand: Jaume Cugat Mulet

Títol tesi: *Fabrication and characterization of waveguides on rbtio<sub>po</sub>4 crystals for photonic applications*

Data defensa: 20-06-13

Doctorat europeu: No

Directores: Rosa Maria Solé, Magdalena Aguiló

Doctorand: Xavier Cardó Moreno

Títol tesi: *Obtenció catalítica selectiva dels isòmers conjugats de l'àcid linoleic (clas) amb propietats antitumorals i nutricionals*

Data defensa: 05-07-13

Doctorat europeu: No

Directores: Pilar Salagre, Yolanda Cesteros

Doctorand: Oriol Martínez Ferraté

Títol tesi: *Synthesis of dinuclear complexes from ligand design to catalysis*

Data defensa: 25-07-14

Doctorat europeu: Sí

Directors: Carmen Claver, Piet WMN Van Leeuwen

Doctorand: Giovanni Salassa

Títol tesi: *Supramolecular, photophysical and catalytic properties of zn(salphen) based complexes and materials*

Data defensa: 25-07-13

Doctorat europeu: No

Director: Arjan W. Kleij

Doctoranda: Cristina Solé Marcé

Títol tesi: *Synthesis of amino alcohols through one-pot catalytic boron addition sequences*

Data defensa: 26-07-14

Doctorat internacional: Sí

Directors: M. Elena Fernández, Henrik Gulyás

Doctorand: Xavier Aparicio Anglès

Títol tesi: *Computational modelling of polyoxometalates adsorbed on metallic surfaces*

Data defensa: 07-10-13

Doctorat europeu: Sí

Directors: Josep Maria Poblet, Anna Clotet

Doctorand: Isidoro López Marín

Títol tesi: *Water oxidation with mononuclear Ru complexes. Below the tip of the iceberg: the oxo-bridge scenario*

Data defensa: 16-10-13

Doctorat europeu: No

Director: Antoni Llobet

Doctoranda: Crisa Vargas Fuentes

Títol tesi: *Theoretical studies on molecular adsorption and selective hydrogenation catalysts*

Data defensa: 12-11-13

Doctorat europeu: No

Directora: Núria López

Doctoranda: Sabina Alegre Aragonés

Títol tesi: *Screening of modular sugar derived phosphite-based ligand libraries for m-catalyzed reactions. A green approach to catalysts discovery*

Data defensa: 13-12-13

Doctorat europeu: Sí

Directors: Montserrat Diéguez, Òscar Pàmies

Doctoranda: Jessica Cid Torta

Títol tesi: *Nucleophilic versus electrophilic boryl moieties: activation and application in catalysis*

Data defensa: 20-12-13

Doctorat internacional: Sí

Directors: M. Elena Fernández, Jordi Carbó

Doctorand: Atul baban Bansode

Títol tesi: *Exploiting high pressure advantages in catalytic hydrogenation of carbon dioxide to methanol*

Data defensa: 27-03-14

Doctorat europeu: No

Director: Atsushi Urakawa

## **5. Activitats d'extensió**

### **5.1 Conferències donades per científics visitants al Departament**

28 juny 2013

"How strong is strong: Compliance Constants as bond strength descriptors"

Prof. Dr. Jörg Grunenberg

TU Brunswick (Brunsvic, Alemanya)

23 juliol 2012

"Selective synthesis of cyclic carbonates from CO<sub>2</sub> insertion to epoxides catalyzed by nitrogen containing Zn, Mn and Fe complexes"

Prof. Martine Lorraine Christ

Institut de Recherches sur la Catalyse et l'Environnement de Lió

Professor de Química Inorgànica

Universitat de Lió (França)

22 maig 2014

«Quantum chemical and periodic electronic structure studies of Poly-oxygen systems: from O<sub>4</sub> and (O<sub>2</sub>)<sub>4</sub> to the solid high pressure phases»

Prof. Alejandro Ramírez-Solís

Dept. de Física, Facultat de Ciències,

Universitat Autònoma de l'Estat de Morelos (Mèxic)

## 5.2 Activitats d'extensió

### 5.2.1 Divulgació

*Seminaris en centres de secundària*

- Com fer un treball de recerca? – Núria Ruiz, 10
- Del més gran al més petit, un nanomón per explorar – Francesc Díaz, 1
- Noves fonts d'energia – Jaume Massons, 4
- Materials superconductors i sostenibilitat – Francesc Díaz, 4
- L'efecte hivernacle – Jaume Massons, 8
- La química de l'Univers – Pablo Aparicio, 3
- 2014: Any internacional de la cristal·lografia – Joan J. Carvajal, 3
- Um món de làsers – Jona J. Carvajal, 2
- Superordinadors: un microscopi per a la química – Carles Bo, 4
- La llum: l'origen dels colors... i molt més – Mar Reguero, 4

### 5.2.2 Altres activitats

III Concurs de Cristal·lització a l'Escola

Participació en el programa organitzat per la Universitat de Barcelona, la Universitat Rovira i Virgili i la Universitat Autònoma de Barcelona durant tot el curs 2013-14.

Els professors dels instituts participants han fet seminaris (novembre 2013), s'han visitat els centres (març-abril 2014), s'ha organitzat una jornada final a Barcelona de presentació de resultats (abril 2014) i s'ha celebrat una gran jornada final estatal a Madrid (maig 2014).

*Membres del Departament que hi han participat:* Magdalena Aguiló, Maria Cinta Pujol, Joan J. Carvajal, Rosa M. Solé, Laura Escorihuela

*Instituts de la demarcació de Tarragona que hi han participat:* INS Els Pallaresos (els Pallaresos), INS Joan Puig i Ferrer (la Selva del Camp), INS Andreu Nin (el Vendrell), INS Mediterrània (el Vendrell), INS Vila-seca (Vila-seca), INS Terra Alta

(Gandesa), INS Berenguer d'Entença (l'Hospitalet de l'Infant), INS Pont d'Icart (Tarragona)

*Premis obtinguts a la Final Catalana:*

Primer Premi Millor Composició Cristal·lina: Institut Berenguer d'Entença (l'Hospitalet de l'Infant)

Primer Premi Millor Cristall Únic: INS Vila-seca (Vila-seca)

*Premis obtinguts a la Final Estatal:*

Accessit: INS Vila-seca (Vila-seca)

*Fem Recerca*

Participació en el programa organitzat per la Universitat Rovira i Virgili al voltant de la Setmana de la Ciència durant el primer trimestre del curs 2013-14.

*Participació en l'Olimpíada Física de Catalunya.*

Jaume Massons

## **6. Activitats de responsabilitat social universitària:**

### **6.1 Desenvolupament tecnològic i científic sostenible: protecció del medi ambient**

*Organització de les VII Jornades de Química Verda*

Dirigides als alumnes de tots els cursos de la llicenciatura de Química i de Bioquímica, i als alumnes del grau de Química, Bioquímica i Biologia Molecular, durant les quals s'han fet tot un conjunt d'activitats: conferències, visita a empreses, taula rodona i documental, encaminades a fomentar una pràctica de la Química basada en els 12 principis de la Química Verda. 2-4 d'abril de 2014.

## Memòria econòmica

Estats de comptes de les orgàniques gestionades pel director del Departament:

480000 PRESSUPOST CORRENT			
TOTAL VINCULACIÓ	INGRESSOS	DESPESES	ROMANENT
1	941,21	0,00	941,21
2	37.967,62	32.204,58	5.763,04
48	1.729,70	0,90	1.728,80
62	17.615,02	15.985,40	1.629,62
TOTAL	58.253,55	48.190,88	10.062,67

El pressupost corrent del Departament s'ha destinat a cobrir despeses diverses com: compra de material d'oficina, consumibles informàtics, material de laboratori per a la docència i la recerca, equipament docent, despeses de locomoció i manteniment per a assistència a jornades i congressos, etc.

4800086 APORTACIÓ PLA ESTRATÈGIC			
TOTAL VINCULACIÓ	INGRESSOS	DESPESES	ROMANENT
2	0,00	0,00	0,00
48	0,00	0,00	0,00
62	7.880,37	7.880,37	0,00
TOTAL	7.880,37	7.880,37	0,00

El pressupost del Pla Estratègic ha cofinançat, aquest any, la compra d'equipament docent.

4800354 CÀNONS DEPARTAMENT			
TOTAL VINCULACIÓ	INGRESSOS	DESPESES	ROMANENT
2	62.802,27	22.752,28	40.049,99
48	870,00	120,00	750,00
62	8.688,53	6.458,58	2.229,95
TOTAL	72.360,80	29.330,86	43.029,94

Els diners dels cànon generats per projectes dels professors d'aquest Departament han servit per fer pagaments de diversa índole, com missatgeria de documents, material d'oficina, material de laboratori, despeses de representació per a jornades i congressos, etc.

4800368 PACTE DE DEDICACIÓ			
TOTAL VINCULACIÓ	INGRESSOS	DESPESES	ROMANENT
2	24.070,26	9.200,61	14.869,65
48	818,00	393,49	424,51
62	6.727,55	5.998,50	729,05
TOTAL	31.615,81	15.592,60	16.023,21

Dins el pressupost de l'any 2013, es van ingressar els diners corresponents a l'any 2014. Aquesta quantitat incrementa els ingressos inicials en 9.911,34 euros.

Els diners destinats a premiar l'activitat acadèmica s'han utilitzat per a l'adquisició de compra de materials i serveis que complementen la docència i la recerca del professorat del Departament, com aparells informàtics, despeses de representació per assistir a congressos, etc.