

Departament de Química Analítica i Química Orgànica

Campus Sescelades, Edifici N4
Marcel·lí Domingo, s/n - 43007 Tarragona
Tel. 977 559 769 – Fax 977 558 446
secqaqo@urv.cat

Dr. F. Xavier Rius Ferrús, director
Dra. Marina Galià Clua, secretària

Estructura personal

El Departament de Química Analítica i Química Orgànica (DQAQO) agrupa els professors de les àrees de coneixement de Química Analítica i de Química Orgànica. El Departament està integrat per:

Catedràtics d'universitat	11
Professors titulars d'universitat	9
Professors associats	4
Agregats	2
Investigador/a Programa Ramon y Cajal	1
Professor/a lector	2
Professor/a visitant	1
Investigadors Programa Juan de la Cierva	1
Investigadors postdoc	3
Investigadors en formació predoctoral	33
Suport administratiu	2
Tècnics de suport a la docència	2
Tècnics de suport a la recerca	2
Tècnics de suport a la gestió	1
<hr/> Total	<hr/> 74

En la sessió del Consell de Govern de desembre de 2013, en la qual es va aprovar el pressupost de la URV per a l'any 2014, es va decidir, entre altres accions, que "En l'àmbit del PDI, s'ha fixat l'objectiu d'una reducció d'un milió d'euros anual. Per a aquest càlcul s'ha pres com a referència un estalvi del 10% de la càrrega docent". Per assolir aquesta reducció s'ha aprovat una minoració en la plantilla oficial que s'ha traslladat als departaments mitjançant un sistema distributiu utilitzant com a criteris l'encàrrec docent del Departament, el cost real de la plantilla del Departament i els crèdits per estudiant.

Un cop avaluats els compromisos docents i de plantilla assumits pel nostre Departament, es pren la decisió d'assumir aquesta minoració i reduir el nombre d'investigadors en formació de plantilla en 3 dels 11 de què es disposa. Respecte a les beques implicades, el Departament acorda:

a) El/la investigador/a en formació no noti res respecte al seu sou i condicions de la beca o contracte perquè el departament aportarà els recursos necessaris per garantir-lo.

b) La repercussió no serà mai directa sobre el grup de recerca que tingui actualment assignada la beca o contracte, sinó que repercutirà en tots els grups d'investigació del departament.

Durant aquest curs el departament també ha incorporat un professor visitant, el Dr. David Badía Valiente.

Memòria acadèmica

La direcció estratègica i de govern del Departament de Química Analítica i Química Orgànica és fruit de la Planificació Estratègica dissenyada per al període 2014-2017. Aquesta planificació s'orienta per establir el nou Contracte Programa per a aquest període (2014-17).

L'objectiu prioritari d'aquest nou contracte programa és la revisió de l'oferta acadèmica, que implica també la seva reordenació i l'adequació a la demanda social actual. Atès l'abast d'aquest objectiu, es porta a terme de forma conjunta amb la Facultat de Química, el Departament de Bioquímica i el Departament de Química Física i Inorgànica.

Aquest contracte programa s'ha dividit en dues fases:

- Fase 1: Anàlisi i planificació
- Fase 2: Desenvolupament i avaluació

S'ha planificat que aquesta Fase 1 s'executi durant el curs 2014-15, amb la discussió i aprovació de les propostes presentades durant el Consell de Govern previst per a l'octubre de 2015.

Per dur a terme aquest contracte programa s'han vehiculat tres equips de treball:

- Comissió formada per l'equip deganal de la Facultat de Química i la direcció dels tres departaments.
- Comissió per a la relació amb l'ensenyament secundari.
- Grup per a la internacionalització dels estudis de grau.

Fruit del treball realitzat per aquestes comissions, es van presentar a Junta de Facultat les fitxes corresponents a la proposta inicial de tres nous màsters:

- Màster Universitari en Ciència i Divulgació
- Màster Universitari en Desenvolupament Professional per a la Indústria
- Màster Universitari en Tècniques d'Anàlisi Forense.

Actuacions d'avaluació i millora

La URV disposa d'un sistema de gestió de la qualitat, certificat sota els requeriments de la norma ISO 9001, de les activitats de recerca, desenvolupament, innovació, transferència de coneixement i tecnologia de 22 grups de recerca i 5 centres d'innovació. Aquest reconeixement comporta la millora de la competitivitat i representa un segell distintiu de la qualitat de la recerca de la URV.

El dia 23 de març de 2015, l'empresa certificadora TÜV Rheinland Group va fer l'auditoria de seguiment del sistema de gestió de la qualitat de quatre grups de recerca del nostre Departament, segons la norma ISO 9001:2008.

Com a resultat de l'auditoria externa, l'equip auditor va recomanar que un cop verificades les correccions i les accions correctives de les no conformitats identificades, s'emetessin els nous certificats.



El Departament disposa de quatre grups de recerca certificats en la norma ISO 9001, que són: el grup de recerca *Instrumental Sensometry (iSens)*, el grup de recerca en *Cromatografia, Aplicacions Mediambientals (CROMA)*, el grup de recerca en *Síntesi Orgànica Estereoselectiva, Química de Carbohidrats (SINTCARB)* i de *Polímers Sostenibles (SUSPOL)*. Aquests quatre grups disposen d'un sistema de gestió de la qualitat plenament consolidat i amb anys d'experiència i millora continuada.

Comunicació i relacions externes. Convenis més importants

S'ha de destacar el gran nombre de col·laboracions dels grups de recerca del Departament amb altres institucions de recerca nacionals i internacionals, tal com es veu reflectit en el nombre de publicacions compartides amb altres institucions. La mobilitat del personal investigador es veu afavorida amb l'existència d'aquestes col·laboracions.

El Departament també afavoreix la mobilitat del seu personal d'administració i serveis. Durant aquest curs, el personal d'administració i serveis del Departament ha fet una estada a la Universitat Lliure de Berlín, en el marc de la FU Berlin International Week 2014 STT per a personal d'universitats europees i en el marc del Programa d'ajuts de mobilitat per al personal de les institucions d'ensenyament superior per formació (programa Erasmus STT).

Pel que fa a col·laboracions, s'han convidat diferents investigadors de prestigi i s'han mantingut les relacions amb l'Institut Català d'Investigació Química (ICIQ), tant en l'àmbit de recerca com en temes docents, mitjançant la participació de l'Institut en assignatures dels màsters coordinats pel Departament i l'existència de diferents projectes de recerca amb el grup de recerca de Quimiometria, Qualime-

tria i Nanosensors i el grup de recerca Síntesi Orgànica Estereoselectiva, Química dels Carbohidrats finançats per la URV amb el seu programa d'ajuts de recerca cooperativa en l'àmbit de la química per a la realització de projectes d'investigació conjunts entre grups de recerca de la URV i de l'ICIQ.

El nostre Departament ha participat en el conveni signat per l'empresa Henkel i la URV, que busca impulsar la investigació en l'àmbit de la química i l'energia, un dels àmbits prioritaris del Campus d'Excel·lència Internacional Catalunya Sud. Aquest curs, mitjançant el Programa d'ajuts URV-HENKEL de mobilitat postdoctoral, s'ha seleccionat una investigadora postdoctoral, que ha dut a terme el seu projecte en el grup de recerca Polímers Sostenibles, orientat a l'obtenció de nous adhesius basats en sistemes de poliuretà. La dotació del programa d'ajuts, cofinançat entre empresa i universitat, ha estat de 120.000 €. El finançament aportat per la URV prové dels fons finalistes per a l'atracció de talent obtinguts pel CEICS en el programa del Campus d'Excel·lència Internacional.

Màsters i doctorats

Els màsters universitaris, adaptats a l'Espai Europeu d'Educació Superior, tenen com a finalitat la formació avançada de l'estudiant i corresponen al segon cicle de l'educació universitària, és a dir, s'adrecen als estudiants que tenen un títol universitari oficial. Permeten adquirir una formació avançada d'especialització per a la pràctica professional o per a la recerca.

Els membres del Departament participen en la docència dels següents màsters:

- Síntesi, Catàlisi i Disseny Molecular
- Nanociència, Materials i Processos: Tecnologia Química de Frontera
- Tècniques Cromatogràfiques Aplicades
- Enginyeria Termodinàmica de Fluids
- Dret Ambiental
- Enologia
- Enginyeria Ambiental i Producció Sostenible

El doctorat és el tercer cicle dels estudis universitaris, i condueix a l'adquisició de les competències i habilitats relacionades amb la recerca científica de qualitat. Actualment, aproximadament el 45% dels membres del Departament són estudiants de doctorat (doctorands).

L'activitat essencial del doctorand és la recerca, però els programes de doctorat també inclouen activitats formatives, que poden ser transversals (comunes a tots els doctorands) o específiques de l'àmbit del doctorat.

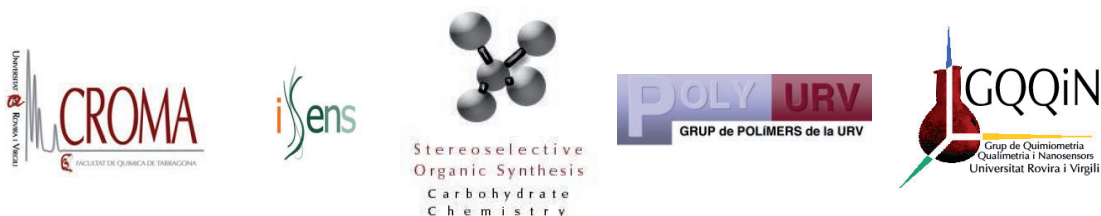
Els investigadors del Departament estan integrats en els tres programes de doctorat següents:

- Ciència i Tecnologia Química
- Nanociència, Materials i Enginyeria Química
- Enologia i Biotecnologia

Aquests tres programes de doctorat han rebut la Menció cap a l'Excel·lència de qualitat atorgada pel Ministeri d'Economia i Competitivitat.

Activitats de recerca i transferència

L'activitat d'investigació del Departament gira entorn de cinc grups de recerca. Les línies de recerca que investiguen els nostres grups de recerca es descriuen a continuació. La recerca dels grups ha estat subvencionada per diversos ajuts, entre els quals destaquen 12 grans projectes de recerca d'administracions públiques d'àmbit nacional i 2 d'àmbit internacional. Així mateix, tots els grups de recerca del Departament han assolit la qualificació de Grups de Recerca Reconeguts per part del Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació, de la Generalitat de Catalunya en la convocatòria del 2014. També s'ha potenciat la mobilitat d'investigadors per incrementar la col·laboració científica amb altres universitat nacionals i estrangeres. Aquesta activitat s'ha vist reflectida en la presentació i defensa de 20 tesis doctorals, en més d'una seixantena d'articles en publicacions científiques internacionals i en la presència de professors del Departament com a ponents i professors invitats en congressos dels àmbits nacional i internacional.



Grup de Cromatografia, Aplicacions Mediambientals (CROMA)

Aquest grup du a terme la seva recerca principalment en els àmbits de la determinació i control dels contaminants orgànics en mostres ambientals i biològiques mitjançant l'ús de noves tècniques d'extracció combinades amb l'última generació de tècniques cromatogràfiques i d'electroforesi capil·lar. També treballa en estreta col·laboració amb grups recerca de química de polímers i en altres institucions en la síntesi de nous materials per ser aplicats en tècniques d'extracció. Una altra àrea d'interès del grup és el desenvolupament i l'aplicació de nous mètodes de mesura per determinar els diferents radioisòtops en mostres ambientals, que es duen a terme en el laboratori URAIS.

Línies de recerca:

- Desenvolupament de nous mètodes per determinar els contaminants orgànics en mostres ambientals com ara aigua, fang, aire...
- Disseny de tècniques de preconcentració aplicades a l'electroforesi capil·lar per determinar contaminants en mostres ambientals i biològiques.
- Síntesi de nous sorbents polimèrics per a l'extracció en fase sòlida.
- Anàlisi de nivells de radioactivitat en mostres ambientals.

Grup de Sensometria Instrumental (iSens)

La recerca en aquest grup se centra a millorar el coneixement que tenim sobre els aliments, tenint en compte la composició, l'elaboració i la conservació final. Aquests temes són considerats no només des d'un punt de vista químic, sinó també des d'una perspectiva sensorial, ja que les propietats organolèptiques són crucials per a l'acceptació o el rebuig de qualsevol aliment per part del consumidor.

El grup de recerca treballa en el desenvolupament d'eines o estratègies analítiques útils per al control de qualitat i l'autenticitat dels aliments. La seva línia més innovadora és la relacionada amb la sensometria instrumental, que té com a objectiu la definició de perfils sensorials de productes típicament mediterranis. Aquesta línia es recolza en tècniques ràpides d'anàlisi (*e-panel: e-nose, e-tongue, e-eye*) i en tècniques de referència cromatogràfiques (HPLC, GC, GCO), en les quals el grup té àmplia experiència.

Línies de recerca:

- Elaboració i validació de nous mètodes cromatogràfics per a l'anàlisi d'aliments.
- Caracterització d'aromes en els aliments per cromatografia de gasos amb detecció olfatomètrica.
- Control de qualitat dels aliments mitjançant tècniques ràpides (nas i llengua electrònica).
- Sensometria instrumental per a l'establiment de les especificacions de qualitat de l'alimentació mediterrània.

Grup de Quimiometria, Qualimetria i Nanosensors (QQiN)

La missió d'aquest grup de recerca és avançar en el disseny d'eines i mètodes per obtenir informació de qualitat de les anàlisis químiques i transferir aquest coneixement a les indústries i laboratoris. Els avenços són impulsats per la investigació en tres línies principals: el disseny de sensors i nous enfocaments de detecció, anàlisi multivariada de dades químiques i qualimetria. La transferència de coneixement implica l'assessorament i l'avaluació científica, cursos de formació per al personal tècnic, publicacions, patents i innovació.

El grup centra la seva principal activitat de recerca en aspectes com la fabricació de sensors químics basats en les noves propietats que introdueix la nanotecnologia. Actualment es dissenyen i es fabriquen teixits intel·ligents que incorporen sistemes sensors i que permeten detectar problemes relacionats amb les persones que usen aquests teixits. D'altra banda, també s'estudia el disseny i l'optimització de mètodes ràpids d'anàlisi específicament pensats per ser usats en línia, basats en metodologies espectroscòpiques. Una altra línia de recerca fa referència a la sensometria instrumental. La sensometria instrumental pretén relacionar les respostes que proporcionen els instruments d'anàlisi (per exemple, espectrofotòmetres) amb les propietats sensorials dels aliments. La recerca té un elevat component d'anàlisi estadística multivariant que emprà models de classificació, calibratge i fusió de dades, entre altres.

Línies de recerca:

- Establiment de mètodes per a la classificació de micromatrius d'ADN aplicat a la detecció de càncer.
- Creació d'avaluació de la traçabilitat dels aliments a partir de la seva anàlisi química.
- Desenvolupament de sensors (bio) químics basats en materials nanoestructurats.
- Fabricació de teixits intel·ligents.

Grup de Polímers (POLYURV)

La investigació se centra principalment a sintetitzar i caracteritzar nous materials polimèrics, i a contribuir a la innovació i el desenvolupament en aquest camp. La feina se centra en la síntesi de polímers amb propietats definides per a aplicacions en diferents camps: polímers de recursos renovables, benzoxazines com a materials d'enginyeria, termoestables per a revestiments i polímers líquids cristal·lins columnars per a la preparació de membranes d'intercanvi de protons.

Línies de recerca:

- Obtenció de polímers cristall líquid per a membranes aplicables en el camp de la generació d'energia solar.
- Obtenció de polímers termostables d'altres prestacions i amb bones propietats mecàniques, amb aplicacions en camps com l'aeroespacial i l'electrònica.
- Obtenció i disseny sostenible de polímers i processos químics utilitzant matèries primeres d'origen renovable i polímers retardants a la flama.

Grup de Síntesi Orgànica Estereoselectiva, Química dels Carbohidrats (SINTCARB)

El grup de recerca centra la seva activitat principal en l'elaboració de nous protocols de síntesi dirigits a la preparació de molècules actives, entre les quals hi ha glucòsids, i més recentment es treballa en glicoconjugats com ara els glicolípidis. L'objectiu final és proporcionar quantitats sintètiques de mostres homogènies pures per a estudis en glicoquímica i glicobiologia. En aquest context, se centra en la síntesi de noves estructures que contenen hidrats de carboni i en l'estudi de les interaccions amb les proteïnes i els receptors relacionats. Per abordar aquest objectiu general s'han dut a terme noves reaccions i nous mètodes de síntesi dirigits a la preparació de compostos i derivats actius orgànicament, que inclouen reaccions catalitzades per metalls de transició i compostos orgànics, per síntesi asimètrica, etc.

Línies de recerca:

- Química dels carbohidrats i nucleòsids.
- Síntesi de productes naturals.
- Síntesi de clústers de lípidis i estudi de la seva interacció amb els receptors biològics.

- Nous mètodes de síntesi basats en reaccions catalitzades per metalls de transició.
- Catàlisi asimètrica.

Articles publicats durant el 2014

“Evaluation of strong cation-exchange polymers for the determination of drugs by solid-phase extraction-liquid chromatography-tandem mass spectrometry”

N. Fontanals, N. Miralles, N. Abdullah, A. Davies, N. Gilart, P.A.G. Cormack
Journal of Chromatography A, 1343

“Selective materials for solid-phase extraction in environmental analysis”

N. Gilart, F. Borrull, N. Fontanals, R.M. Marcé

Trends in Environmental Analytical Chemistry, 1 (2014) 8-18

“New coatings for stir-bar sorptive extraction of polar emerging organic contaminants”

N. Gilart, R.M. Marcé, F. Borrull, N. Fontanals

Trends in Analytical Chemistry 54, (2014) 11-23

“Selective determination of pharmaceuticals and illicit drugs in wastewaters using a novel strong cation-exchange solid-phase extraction combined with liquid chromatography-tandem mass spectrometry”

N. Gilart, P.A.G. Cormack, R.M. Marcé, N. Fontanals, F. Borrull

Journal of Chromatography A, 1325 (2014) 137-14

“Simultaneous determination of drugs of abuse and their main metabolites using pressurized liquid extraction and liquid chromatography-tandem mass spectrometry”

P. Arbelaez, F. Borrull, R.M. Marcé, E. Pocurull

Talanta, 125 (2014) 65-71

“Study of the retention behavior of iodinated X-ray contrast agents in hydrophilic interaction liquid chromatography, comparing bare silica and zwitterionic stationary phases”

D. Salas, F. Borrull, R.M. Marcé, N. Fontanals

Journal of Separation Science 37, (2014) 1111-1117

“The lipid content in serum affects the extraction efficiencies in highly lipophilic flame retardants”

E. Cequier, R.M. Marcé, G. Becher, C. Thomsen

Environmental Science and Technology Letters, 1 (2014) 82-86

“A quick, easy, cheap, effective, rugged and safe extraction method followed by liquid chromatography-(Orbitrap) high resolution mass spectrometry to determine benzotriazole, benzothiazole and benzenesulfonamide derivatives in sewage sludge”

P. Herrero, F. Borrull, E. Pocurull, R.M. Marcé

Journal of Chromatography A, 1339 (2014) 34-41

“Occurrence of a broad range of legacy and emerging flame retardants in indoor environments in Norway”

E. Cequier, A.C. Ionas, A. Covaci, R.M. Marcé, G. Becher, C. Thomsen

Environmental Science and Technology, 48 (2014)

“Comparison of triple quadrupole mass spectrometry and orbitrap high resolution mass spectrometry in ultra-high performance liquid chromatography for the determination of veterinary drugs in sewage sludge: benefits and drawbacks”

P. Herrero, N. Cortes, J. Caixach, F. Borrull, E. Pocurull, R.M. Marcé

Journal of Mass Spectrometry, 49 (2014)

“A pressurized hot water extraction and liquid chromatography-high resolution mass spectrometry method to determine polar benzotriazole, benzothiazole and benzenesulfonamide derivatives in sewage sludge”

P. Herrero, F. Borrull, R.M. Marcé, E. Pocurull

Journal of Chromatography A, 1355 (2014) 53-60

“Exposure of nitrosamines in thirdhand tobacco smoke increases cancer risk in non-smokers”

N. Ramirez, M.Z. Özel, A.C. Lewis, R.M. Marcé, F. Borrull, J.F. Hamilton

Environment International, 71 (2014) 1

“A high-throughput method for the determination of metabolites of organophosphate flame retardants in urine by ultra high liquid chromatography-high resolution mass spectrometry”

E. Cequier, R.M. Marcé, G. Becher, C. Thomsen

Analytical Chimica Acta, 845 (2014) 98-104

“Development of new polar monolithic coatings for stir bar sorptive extraction”

N. Gilart, R.M. Marcé, P.A.G. Cormack, N. Fontanals, F. Borrull

Journal of Separation Science, 37 (2014) 2225-2

“Benzotriazoles, benzothiazoles and benzenesulfonamides in the environment: an overview of analytical methods and occurrence”

P. Herrero, N. Cortes, J. Caixach, F. Borrull, E. Pocurull, R.M. Marcé

Trends in Analytical Chemistry, 62 (2014)

“Determination of sedative hypnotics in sewage sludge by pressurized liquid extraction with high-performance liquid chromatography and tandem mass spectrometry”

P. Arbelaez, J. Granados, F. Borrull, R.M. Marcé, E. Pocurull

Journal of Separation Science, 37 (2014) 3481-348

“On-line coupling of solid-phase extraction to gas chromatography-mass spectrometry to determine musk fragrances in wastewater”

L. Vallecillos, F. Borrull, E. Pocurull

Journal of Chromatography A, 1364 (2014) 1-11

“Study of reverse osmosis treatment for micropollutants rejection in advanced water reuse applications”

C. Martínez, V. Gómez, D. Dubert, K. Majamaa, E. Pocurull, F. Borrull

Desalination and Water Treatment, (2014)

“Pressurized liquid extraction and liquid chromatography-tandem mass spectrometry applied to determine iodinated X-ray contrast media in sewage sludge”

S. Echeverría, F. Borrull, E. Pocurull, N. Fontanals

Analytica Chimica Acta, 844 (2014) 75-79

“Simultaneous determination of disinfection by-products in water samples from advanced membrane treatments by headspace solid phase microextraction and gas chromatography-mass spectrometry”

C. Martínez, V. Gómez, F. Borrull, E. Pocurull

Analytical and Bioanalytical Chemistry Research, 1 (2014) 38-49

“Headspace stir bar sorptive extraction followed by thermal desorption and gas chromatography with mass spectrometry to determine musk fragrances in sludge samples without sample pretreatment”

L. Vallecillos, M. Pedrouzo, E. Pocurull, F. Borrull

Journal of Separation Science, 37 (2014) 1322-1329

“Determination of ^{90}Sr and ^{210}Pb in sludge samples using a LOV-MSFIA system and liquid scintillation counting”

M. Mola, J. Avivar, A. Nieto, A. Peñalver, C. Aguilar, I. Ferrer, V. Cerdà, F. Borrull

Applied Radiation and I

“Uranium and thorium sequential separation from NORM samples by using a SIA system”

M. Mola, A. Nieto, A. Peñalver, F. Borrull, C. Aguilar

Journal of Environmental Radioactivity, 127 (2014) 82-87

"In-line solid-phase extraction-capillary zone electrophoresis for the determination of barbiturate drugs in human urine"

Botello, F. Borrull, C. Aguilar, M. Calull

Analytical Sciences, 30 (2014) 971-977

"Surfactants"

E. Pocurull, R.M. Marcé

Handbook of Water Analysis. Pages 825-843. CRC Press, Boca Ratón, 2014

"Polyketoesters from Oleic Acid. Synthesis and Functionalization"

M. Moreno, G. Lligadas, J.C. Ronda, M. Galià, V. Cádiz

Green Chem 2014, 16, 1847-1853

"Convenient and Solventless Preparation of Pure Carbon Nanotube/Polybenzoxazine Nanocomposites with Low Percolation Threshold and Improved Thermal and Fire Properties"

C. Zúñiga, L. Bonnaud, G. Lligadas, J.C. Ronda, M. Galià, V. Cádiz, P. Dubois

J Mater Chem A 2014, 2, 6814-6822

"Antimicrobial Polyurethane Thermosets based on Undecylenic Acid: Synthesis and Evaluation"

C. Lluch, B. Esteve-Zarzoso, A. Bordons, G. Lligadas, J.C. Ronda, M. Galià, V. Cádiz

Macromol Biosci DOI 10.1002/mabi.201400017

"Multivariate experimental design in environmental analysis"

M. Pilar Callao

TrAC Trends in Analytical Chemistry, 2014, 62, 86 - 92

"Classification of soil samples based on Raman spectroscopy and X-ray fluorescence spectrometry combined with chemometric methods and variable selection"

A.S. Luna, I.C.A. Lima, W.F.C. Rocha, J.R. Araújo, A. Kuznetsov, E.H.M. Ferreira, R. Boqué, J. Ferré,

Analytical Methods, 2014, 6, 8930-8939

"Partial least squares density modeling (PLS-DM) - A new class-modeling strategy applied to the authentication of olives in brine by near-infrared spectroscopy"

P. Oliveri, M.I. López, M.C. Casolino, I. Ruisánchez, M.P. Callao, L. Medini, S. Lanteri

Analytica Chimica Acta, 2014

"Fast and robust discrimination of almonds (*Prunus amygdalus*) with respect to their bitterness by using near infrared and partial least squares-discriminant analysis"

E. Borràs, J.M. Amigo, F. Van Den Berg, R. Boqué, O. Busto,

Food Chemistry, 2014, 153, 15-19

“Validation of multivariate screening methodology. Case study: Detection of food fraud”

M. Isabel López, Núria Colomer, Itziar Ruisánchez, M. Pilar Callao

Analytica Chimica Acta, 2014, 827, 28-33

“A reference electrode based on polyvinyl butyral (PVB) polymer for decentralized chemical measurements”

Tomàs Guinovart, Gastón A. Crespo, F. Xavier Rius, Francisco J. Andrade

Analytica Chimica Acta, 2014, 821, 72 - 80

“Epidermal tattoo potentiometric sodium sensors with wireless signal transduction for continuous non-invasive sweat monitoring”

Amay J. Bhandodkar, Denise Molinnus, Omar Mirza, Tomás Guinovart, Joshua R. Windmiller, Gabriela Valdés-Ramírez, Francisco J. Andrade, Michael J. Schöning, Joseph Wang

Biosensors and Bioelectronics, 2014, 54, 603 - 609

“Graphene-based potentiometric biosensor for the immediate detection of living bacteria”

R. Hernández, C. Vallés, A.M. Benito, W.K. Maser, F. Xavier Rius, J. Riu

Biosensors and Bioelectronics, 2014, 54, 553-557

“A paper-based potentiometric cell for decentralized monitoring of Li levels in whole blood”

M. Novell, T. Guinovart, P. Blondeau, F.X. Rius, F.J. Andrade

Lab on a Chip - Miniaturisation for Chemistry and Biology, 2014, 14, 1308-1314

“Multivariate screening in food adulteration: Untargeted versus targeted modelling”

M. Isabel López, Esther Trullols, M. Pilar Callao, Itziar Ruisánchez

Food Chemistry, 2014, 147, 177 - 181

“Computer-operated analytical platform for the determination of nutrients in hydroponic systems”

F. Xavier Rius-Ruiz, Francisco J. Andrade, Jordi Riu, F. Xavier Rius

Food Chemistry, 2014, 147, 92 - 97

“Bandage-Based Wearable Potentiometric Sensor for Monitoring Wound” pH

Tomàs Guinovart, Gabriela Valdés-Ramírez, Joshua R. Windmiller, Francisco J. Andrade, Joseph Wang

Electroanalysis, WILEY-VCH Verlag, 2014, 26, 1345-1353

“Tuning the Selectivity in the Hydrogenation of Aromatic Ketones Catalyzed by Similar Ruthenium and Rhodium Nanoparticles”

J. Llo, E. Bresó, P. Blondeau, B. Chaudret, S. Castellón, C. Claver, C. Godard

ChemCatChem, 2014, 6, 3160-3168

“Rhodium-catalyzed Regio- and Stereoselective Oxyamination of Dienes via Tandem Aziridination/Ring-opening of Dienyl Carbamates”

J. Guasch, Y. Díaz, M.I. Matheu, S. Castellón

Chem. Comm. 2014, 50, 7344-7347

“Ruthenium-Catalyzed Cross-Metathesis with Electron-Rich Phenyl Vinyl Sulfide Enables Access to 2,3-Dideoxy-D-ribose Ring System Donors”

O. Boutureira, M.I. Matheu, Y. Díaz, S. Castellón

RSC Advances 2014, 4, 19794-19799

“Syntheses of a Novel Fluorinated Trisphosphinoborate Ligand and Its Copper and Silver Complexes. Catalytic Activity toward Nitrene Transfer Reactions”

I. Arenas, M. A. Fuentes, E. Alvarez, Y. Díaz, A. Caballero, S. Castellón, P. J. Pérez

Inorg. Chem. 2014, 53, 3991-3999

“Tuning the Stereoelectronic Properties of 1-Sulfanyl-hex-1-enitols for the Sequential Stereoselective Synthesis of 2-Deoxy-2-iodo-beta-D-allopyranosides”

A. Köver, O. Boutureira, M.I. Matheu, Y. Díaz, S. Castellón

J. Org. Chem. 2014, 79, 3060-3068

“Chemo, Regio- and Stereoselective Silver-Catalyzed Aziridination of Dienes: Scope, Mechanistic Studies and Ring-Opening Reactions”

J. Llaveria, A. Beltran, W.M.C. Sameera, A. Locati, M. Mar Díaz-Requejo, M.I. Matheu, S. Castellón, F. Maseras, P.J. Pérez

J. Am. Chem. Soc. 2014, 136, 5342-5350

“Influence of Emulsification Technique and Wall Composition on Physicochemical Properties and Oxidative Stability of Fish Oil Microcapsules Produced by Spray Drying”

S. Ramakrishnan, M. Ferrando, L. Aceña-Muñoz, M. Mestres, S. De Lamo-Castellví, C. Güell

Food and Bioprocess Technology: An International Journal 7 (2014) 1959-1972

“A versatile thiol-ene/sol-gel two-stage curing process based on a hyperbranched polyester with different degrees of 10-undecenyl modification”
Flores, M., Foix, D., Serra, A., Ramis, X., Sangermano, M.

Macromol. Mat. Eng. 299, 495-503, 2014

“From Curing kinetics to network structure: A novel approach to the modeling of the network build-up of epoxy-anhydride thermosets”

Fernández-Francos, X., Ramis, X., Serra, A.

J. Polym. Sci. Part A: Polym. Chem. 52, 61-75, 2014

“Photocuring of cycloaliphatic epoxy formulations using polyesters with multiarm star topology as additives”

Flores, M., Fernández-Francos, X., Ramis, X., Sangermano, M., Ferrando, F., Serra, A.
J. Appl. Polym. Sci. 131, 1-9, 2014

“Comparative analysis of stochastic network build-up methods for the curing of epoxy-anhydride thermosets”

Fernández-Francos, X., Ramis, X., Serra, A.
Eur. Polym. J. 53, 22-36, 2014

“New epoxy-anhydride thermosets modified with multiarm stars with hyperbranched polyester cores and poly(ϵ -caprolactone) arms”

Tomuta, A., Fernández-Francos, X., Ferrando, F., Serra, A., Ramis, X.
Polym-Plast Technol Eng. 53, 645-654, 2014

“Highly exfoliated nanostructure in trifunctional epoxy/clay nanocomposites using boron trifluoride as initiator”

Hutchinson, J.M., Shiravand, F., Calventus, Y., Fernández-Francos, X., Ramis, X.
J. Appl. Polym. Sc. DOI: 10.1002/APP.40020, 2014

“The use of multiarm star-like polymers in the preparation of epoxy thermosets by UV-Cationic Photopolymerization. Effect of the arms of the star in the curing process and in the final properties and morphology”

Foix, D., Morell, M., Serra, A., Sangermano, M.
Polym Eng Sci 54, 17-23, 2014

“Effect of hydroxyl ended and end-capped multiarm star polymers on the curing process and mechanical characteristics of epoxy/anhydride thermosets”

Acebo, C.; Picardi, A.; Fernández-Francos, X.; De la Flor, S.; Ramis, X.; Serra, À.
Prog. Org. Coat. 77, 1288 -1298, 2014

“Cure kinetics modeling and thermomechanical properties of cycloaliphatic epoxy-anhydride thermosets modified with hyperstar polymers”

Belmonte, A.; Däbritz, F.; Ramis, X.; Serra, À.; Voit, B.; Fernández-Francos, X.
J. Polym. Sci. Part B: Polym. Phys. 5, 1227-1242, 2014

“Novel epoxy-silica hybrid coatings by using ethoxysilyl-modified hyperbranched poly(ethyleneimine) with improved scratch resistance”

Acebo, C.; Fernández-Francos, X.; Messori, M.; Ramis, X.; Serra, À.
Polymer 55, 5028-5035, 2014

“New epoxy thermosets modified with amphiphilic multiarm star polymers as toughness enhancer”

Lagunas, C.; Fernández-Francos, X.; Ferrando, F.; Flores, Marjorie; Serra, À.; Morancho, J.; Salla, J.; Ramis, X.

React. Funct. Polym. 83, 132-143, 2014

“New catalysts for diglycidyl ether of bisphenol A curing based on thiol-epoxy click reaction”

Guzmán, D.; Ramis, X.; Fernández-Francos, X.; Serra, À.

Eur. Polym. J. 59, 377-386, 2014

“Theoretical modeling of the effect of proton donors and regeneration reactions in the network build-up of epoxy thermosets using tertiary amines as initiators”

Fernandez-Francos, X.

European Polymer Journal, 55, 35-47, 2014

Tesis doctorals

S’han defensat 20 tesis doctorals durant l’any 2014, 12 amb menció europea. Els treballs defensats han estat:

PELLEJÀ PUXEU, LAIA

EXPLORING NOVEL DYE CONCEPTS IN DYE SENSITIZED SOLAR CELLS

FAN, XINYUAN

TOWARDS MORE SUSTAINABLE CHEMICAL PROCESSES: STUDIES ON COVALENT AND NON-COVALENT CATALYST IMMOBILIZATION

HERRERO GIL, POL

ANALYTICAL METHODS FOR THE DETERMINATION AND EVALUATION OF EMERGING ORGANIC CONTAMINANTS IN ENVIRONMENTAL WATERS AND SLUDGE

OSORIO PLANES, LAURA

RATIONAL APPROACHES TO THE CONTROL OF MOLECULAR FUNCTION: FROM CATALYSIS TO SELF-ASSEMBLY

PITAVAL, ANTHONY MICHAËL DAMIEN

GOLD CATALYSIS FOR THE SYNTHESIS OF PROTOILLUDANE SESQUITERPENES AND OTHER CYCLIC SYSTEMS

TIAN, XU

NEW ASYMMETRIC ORGANOCATALYTIC PROCESSES PROMOTED BY CINCHONA-BASED PRIMARY AMINES

CABAU PARRA, LYDIA

DESIGN AND SYNTHESIS OF SMALL MOLECULES FOR ORGANIC AND GRÄTZEL SOLAR CELLS

ARENAS GONZÁLEZ, ISMAEL

COPPER, SILVER AND RUTHENIUM COMPLEXES WITH TRIDENTATE LIGANDS. APPLICATION AS CATALYSTS IN AZIRIDINATION, C-H INSERTION AND HYDROGENATION REACTIONS

MON QUÍLEZ, IGNACIO LUIS

DESIGN, SYNTHESIS AND APPLICATION OF SUPRAMOLECULAR LIGANDS IN ASYMMETRIC HYDROGENATION AND HYDROFORMYLATION

GAYDOU, MORGANE CAROLE

GOLD(I)-CATALYZED CYCLIZATIONS AND ENANTIOSELECTIVE TOTAL SYNTHESIS OF (+)-SCHISANWILSONENE A

CEQUIER MANCIÑEIRAS, ENRIQUE

IDENTIFYING HUMAN EXPOSURE PATHWAYS TO FLAME RETARDANTS

NAPPI, MANUEL
NOVEL AMINOCATALYTIC AND PHOTOCHEMICAL REACTIONS

OBRADORS LLOBET, CARLA
DISSECTING INTERMOLECULAR GOLD CATALYSIS: APPLICATION TO THE TOTAL SYNTHESIS OF RUMPHELLAONE A

GARIBO RUIZ, DIANA
ASSAYS AND BIOSENSORS FOR THE DETECTION OF TOXINS FROM AQUATIC MEDIA

BAUTISTA BARRUFET, ANTONIO
DESIGN AND SYNTHESIS OF PHOTOSWITCHABLE MOLECULES FOR BIOLOGICAL APPLICATIONS

REEH, PHILIPP
DYNAMIC MULTIVALENCY FOR THE RECOGNITION OF PROTEIN SURFACES

HERNÁNDEZ MALO, RAFAEL
SOLID CONTACT POTENTIOMETRIC SENSORS BASED ON CARBON NANOMATERIALS

GILART ALZURIA, NÚRIA
PREPARATION AND APPLICATION OF NOVEL SELECTIVE AND POLAR MATERIALS FOR SORPTIVE EXTRACTION OF EMERGING CONTAMINANTS FROM ENVIRONMENTAL WATERS

WANG, YAHUI
GOLD CARBENES FROM CYCLOHEPTATRIENES: GENERATION AND FATE

KASAPLAR ÓZKAL, PINAR
POLYMER SUPPORTED AND HOMOGENEOUS ORGANOCATALYSTS FOR ASYMMETRIC REACTIONS: FROM BATCH TO CONTINUOUS FLOW APPLICATIONS

Organització de congressos i cursos



GIENOL 2.015

XIII Congreso Nacional de Investigación Enológica

Membres del Departament han organitzat la tretzena edició del Congrés Nacional d'Investigació Enològica, GIENOL2015, que reuneix els investigadors més rellevants de tots els àmbits de la recerca relacionada amb l'enologia. Aquest congrés s'ha dut a terme del 9 al 12 de juny de 2015, al Palau de Congressos de Tarragona. En



total s'hi han presentat 135 comunicacions científiques classificades en funció de la temàtica tractada en els àmbits següents: viticultura, microbiologia, tecnologia enològica, criança o envelliment, anàlisi i control de qualitat del vi i altres. Ha tingut un impacte important tant en la comunitat científica com en el teixit productor de la zona, com es pot reflectir en la gran quantitat d'empreses i cellers que hi han col·laborat.

Activitats d'extensió universitària

- Participació, juntament amb la Facultat de Química, en les activitats de promoció de la química entre els alumnes que cursen educació secundària.
- Participació conjunta amb la Facultat de Química i el Departament de Química Física i Inorgànica en les activitats emmarcades dins la 18a Setmana de la Ciència realitzades al Campus Sescelades.
- Organització de diverses conferències amb professors convidats d'universitats estrangeres, especialistes en àmbits punters de la recerca.

Activitats de responsabilitat social universitària

- El Dr. Francisco Andrade, membre del nostre Departament, lidera el projecte del Hub d'Innovació, centre que funciona en un espai cedit a aquest efecte per la Facultat de Química. Sorgeix de la necessitat de generar maneres innovadores de treballar per posar en pràctica nous conceptes i idees.

Innovation Hub és una iniciativa que busca que:

- a) Es motivin individus i grups per a la generació de propostes innovadores.
- b) S'incorporin eines i metodologies necessàries.
- c) Es posin en pràctica aquestes eines per dur a terme la generació de propostes o la solució creativa de problemes.
- d) S'utilitzin els resultats per modelar els comportaments, actituds i valors d'una cultura innovadora i mobilitzar els més endarrerits.

El treball del Hub d'Innovació en l'àmbit regional ha abastit els àmbits següents:

- Educació
- Àrea científicotècnica
- Àrea empresarial
- Associacions professionals
- Salut pública

Les activitats en les quals s'ha involucrat personal del Departament, organitzades durant el curs 2014/2015, són les següents:

- Tallers per a alumnes d'ESO i batxillerat en el programa Campus Científic d'Estiu.
- Taller per a alumnes i professors de batxillerat en el marc del programa EstiURV.
- Taller per a professors de batxillerat en el marc del programa de la Fundació Catalana per la Recerca.
- Reunions d'assessorament amb l'equip UCI de l'Hospital Universitari Joan XXIII.
- Participació en el programa Emprendoctor.
- I Taller SIT (Systematic Inventive Thinking) per a doctorands de la URV.

- Tallers Design Thinking i Prototipatge Ràpid.
- Conferències per ASBTEC: Associació de Biotecnòlegs de Catalunya.
- Programa TGN-Talent de l'Ajuntament de Tarragona.
- Conferència "Noves eines per a la creativitat: generació d'idees i resolució creativa de problemes – Systematic Inventive Thinking (SIT)".
- Conferència sobre innovació a estudiants de grau de la Facultat de Química.
- Conferència sobre innovació per a doctorands de la Facultat de Turisme.
- Participació en el II Curs d'Innovació i Gestió de la Carrera Professional.
- Conferència "When Science meets Design".



- Participació en l'organització de les VIII Jornades sobre Química Verda. Aquestes jornades pretenen fomentar una pràctica de la química basada en els 12 principis de la Química Verda. En les VIII Jornades sobre Química Verda: A "Reaprofitem els residus" es van matricular un total de 84 estudiants, majoritàriament del grau de Química (81) però també del grau de Bioquímica i Biologia Molecular (3). A la jornada inaugural, el dimecres 15 d'abril de 2015, els estudiants van visitar tres empreses, on van poder comprovar el reaprofitament en els seus processos (Gomà-Camps, Planta de Botarell de Compostatge i Saint-Gobain). Tot seguit el Dr. Jordi Llorca, investigador de l'Institut de Tècniques Energètiques (UPC), va impartir la conferència "Valorització de residus agrícoles i industrials per a fer hidrogen". A continuació, es van lliurar els premis del VI Concurs de Fotografia de la Càtedra DOW/URV de Desenvolupament Sostenible, en col·laboració amb la Facultat de Química. El dia 16 d'abril es va realitzar el taller de saponificació amb la participació del Sr. Miquel Nadal, químic i professor retirat, i el dia 17 d'abril, i com a cloenda es va organitzar el taller debat "Reciclar a qualsevol preu?", amb la participació del Sr. Joan

Ruiz, d'Unió Corporació Alimentària, i el Sr. Enric Villalbí, de Piensos Pro-casa. Aquestes jornades compten amb el patrocini de la Càtedra DOW/URV de Desenvolupament Sostenible i l'Associació Empresarial Química de Tarragona (AEQT).

- Participació en l'organització de la 16a edició dels Premis de Recerca en Química a Tarragona. Premis enfocats a fomentar entre els alumnes de secundària de la nostra demarcació la importància de la recerca en química. En aquesta edició es van presentar prop d'una trentena de treballs, tots de molta qualitat.

MEMÒRIA ECONÒMICA. 2014

En aquesta memòria s'inclouen els ingressos, despeses i romanents que el Departament ha generat durant l'exercici 2014.

Els pressupostos als quals fa referència són: Pressupost Corrent, Contracte Programa i Investigador Actiu. Els pressupostos de foment a la recerca es els gestiona la UGAD i el de Doctorat el gestionen alternativament els dos departaments implicats en el Programa de Doctorat de Ciència i Tecnologia: Dept. de Química Física i Inorgànica i Dept. de Q. Analítica i Q. Orgànica. Durant el 2014 ha estat gestionat pel Departament de QFI.

Els ingressos estan especificats segons la seva procedència, i les despeses estan resumides per conceptes, segons la seva naturalesa.

Taula d'ingressos, despesa i romanent

PRESSUPOST	INICIAL	ROMANENT	DESPESES
Ingressos PED	8.107,47	187,01	7.920,46
ingressos capítol corrent	52.973,00	9.260,71	43.712,29
Ingressos Investigador Actiu	59.927,00	20.072,00	39.855,00
TOTAL €	121.007,47	29.519,72	91.487,75

En el Capítol Corrent, el 83% de la despesa de material inventariable correspon a material adquirit en la convocatòria de cofinançament d'equipament docent.

Quant al Contracte Programa, cal destacar que la despesa més important s'ha fet per cobrir la minoració de la plantilla.

Referent al pressupost d'Investigador Actiu s'han finançat 2 beques d'assistents docents, 4 beques de projecte, 2 beques Martí i Franquès i 2 places d'associats del Departament.

Taula de despesa per conceptes

CONCEPTE	IMPORT
Transferència a Gerència per minoració de plantilla	6.960,86
Llicència Chem Biodraw	800,00
Material oficina	1.456,45
Subscripcions	905,57
Fotocòpies i manteniment fotocopiadora del Departament	1.526,79
Material informàtic de consum (tòner)	2.887,98
Material fungible de laboratori	13.271,98
Telèfon	5.567,04
Missatgers	105,81
Viatges	591,99
Construccions i manteniment	1.949,19
Inventariable	13.410,49
IVA intercomunitari	340,26
Despeses representació	300,00
Millipore (aigua)	656,00
Serveis	902,34
2 Assistents docents	2.438,00
2 Professors associats	3.501,00
4 Beques de projecte	19.363,00
2 Beques Martí i Franquès	14.553,00
TOTAL €	91.487,75

Gràfic de despesa per conceptes

