

## 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. Oscar Pàmies Ollé, secretari

Fins a l'octubre de 2014: 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.

### Rendició de comptes

El Departament ha dut a terme polítiques actives que permetin l'acompliment del contracte programa signat a començament del curs 2011-2012 i vigent encara. En la taula 1 es resumeix el nombre de tesis doctorals defensades durant els cursos 2009-2010, 2010-2011, 2011-2012, 2012-2013, 2013-2014 i 2014-2015, 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/internacional i el nombre de tesis escrites en anglès.

**Taula 1.** *Nombre de tesis doctorals defensades al Departament en el període 2009-2010 a 2014-2015.*

CURS	TESIS DEFENSADES	MENCIÓ EUROPEA/ INTERNACIONAL	ESCRITES EN ANGLÈS
2009-2010	10	9	9
2010-2011	18	10	18
2011-2012	12	8	10
2012-2013	8	7	7
2013-2014	11	5	10
2014-2015	19	11	18
<b>TOTAL</b>	<b>78</b>	<b>50</b>	<b>72</b>

En la taula 2, es presenta la mitjana de tesis doctorals defensades en aquest període, i 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 al contracte programa per al període de 2009-2010 a 2014-2015.

	Total	Tesis realitzades al Departament	Tesis realitzades a l'ICIQ
MITJANA DE NOMBRE DE TESIS PER CURS	13	9	4
% TESIS AMB MENCIÓ EUROPEA/INTERNACIONAL	64,1%	70%	46%
% TESIS ESCRITES EN ANGLÈS	92,3%	85%	100%

D'acord amb les dades presentades, la mitjana de nombre de tesis defensades en aquest període supera el nombre de 8,5 tesis que ens havíem marcat al contracte programa, 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 64,1%**, que queda per sota del llindar del 67,65 % que ens havíem fixat. En aquest punt, cal tenir en compte, però, que també s'hi compten les tesis doctorals realitzades a l'Institut Català d'Investigació Química (ICIQ), de les quals gairebé un 50% no compten amb aquesta menció. Extraient aquestes tesis, el percentatge de tesis amb menció europea o internacional és del 70%, per sobre del llindar establert.

Un altre punt que estem complint d'acord amb el que es va pactar 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 realitzades per membres del Departament en el període 2010-2014.

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

<b>2010</b>	76
<b>2011</b>	75
<b>2012</b>	80
<b>2013</b>	86
<b>2014</b>	84

La mitjana en el nombre de publicacions en aquest període és de 80,2, que queda per sobre del llindar establert de 70 publicacions que havíem fixat en el contracte programa.

També cal mencionar el total acompliment dels indicadors d'accions singulars, consistent en la participació en un projecte internacional USA (NSF) – Spain, i en la realització del Curs d'Iniciació a la Física, tal com ens havíem compromès en el contracte programa. Així mateix, es continua la impartició del Curs d'Iniciació a la Química.

Finalment, pel que fa a projectes de recerca, cal dir que hem complert l'objectiu marcat quant a nombre de projectes europeus i grans projectes en què participen investigadors del Departament, amb 7 projectes dins el 7è programa marc i 5 accions COST, durant tot el període avaluat, superior a la mitjana d'1 projecte que havíem marcat a l'inici del període.

Respecte al nombre de trams bàsics de recerca vius respecte als trams de recerca vius possibles (94 trams), 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 2010-2014. S'indica, a més, en quin programa s'han obtingut, segons les dades facilitades pel Servei de Gestió de la Recerca, completades a partir de les dades dels diferents grups de recerca del Departament.

**Taula 4.** *Ingressos obtinguts per via competitiva procedents de diferents projectes de recerca en el període 2010-2014.*

Origen del finançament	2010	2011	2012	2013	2014
<b>Altres</b>	8.261,11	6.655,50	12.553,50	0	28.322,79
<b>Pla Nacional</b>	1.274.721,95	1.177.687,06	209.027,48	0	692.885,51
<b>Pla de Recerca de Catalunya</b>	773.380,20	151.754,37	565.245,67	0	592.563,85
<b>Europa</b>	311.985,00	88.480,00	2,00	1.077.505	230.037,60
<b>URV</b>	465.661,62	243.725,21	163.753,61	0	265.494,54
<b>Total</b>	<b>2.834.009,88</b>	<b>1.668.302,14</b>	<b>950.582,26</b>	<b>1.077.505</b>	<b>1.809.304,29</b>

La taula 5 mostra els ingressos obtinguts per via no competitiva, que han estat presos de les dades que figuren al pacte de dedicació dels membres del Departament per al període des de 2010-2011 a 2014-2015 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
<b>2010-2011</b>	262.577,13
<b>2011-2012</b>	1.436.951,03
<b>2012-2013</b>	237.100,49
<b>2013-2014</b>	558.981,00
<b>2014-2015</b>	891.850,37

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 increment en els ingressos procedents de projectes del Pla Nacional i de convocatòries lligades a l'AGAUR. Els ingressos obtinguts superen els 700.000 € fixats en el contracte programa. Per la

seva banda, pel que fa als ingressos obtinguts per via no competitiva, es pot veure a la taula 5 que se superen els 200.000 € previstos al contracte programa.

Tot això es reflecteix en un acompliment del contracte programa del 100%.

## **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.

### **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 en Química.

La recerca continua essent una de les activitats prioritàries; es manté tant una productivitat elevada com 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 del web del Departament a l'adreça electrònica:

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

També s'han realitzat accions de promoció per incorporar 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 d'UAA totals és de 21,54 en el curs 2013-2014, que són les últimes dades a les quals tenim accés. La dedicació del PDI destaca clarament en activitats d'investigació o creació (i supera la mitjana d'11,9 UAA).

### **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 en relació amb la recerca que es tradueixen en nombroses publicacions conjuntes. A més, 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 a 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, tant en l'àmbit de la recerca com en temes docents.

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

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

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

Membres del Departament també participen en activitats de formació permanent:

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

### **Matriculació**

Estudiants matriculats en els doctorats del Departament:

- - Ciència i Tecnologia Química: 102 estudiants matriculats

### **Beques**

*Beques per a activitats acadèmiques dirigides de suport al professorat (antigues Assistents Docents):*

Alba Camarasa Mena  
Fatima El Quahabi  
Beatriz Luna Murillo  
Aaron Sanchez-Bermejo Estevan  
Albert Solé Daura

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

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

## **Activitats de recerca i transferència**

### **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: 2
- 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 pre-doctorals:
- FPI Ministeri: 6
  - FPI Generalitat: 8
  - URV: 9
  - BRDI : 8
- Doctorands: 36
- Tècnic gestió EMAS: 1
- Tècnics informàtics: 2
- Tècnics de laboratori: 4
- Administratius: 2
- Becaris assistents docents: 5

### **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·lerenes
- Modelització de la catàlisi homogènia

- Propietats electròniques de polioxoanions
- Modelització de la catàlisi heterogènia
- Espectroscòpia de molècules adsorbides
- 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 aplicacions catalítiques
- Transformació catalítica de glicerina en productes d'alt valor afegit
- Obtenció de CLAs de la isomerització catalítica de l'àcid linoleic
- Eliminació de matèria orgànica mitjançant oxidació catalítica
- Hidrodeclorinació 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*

- Creixements cristal·lins virtuals en entorns de gravetat reduïda
- Anàlisi digital de senyals acceleromètriques; 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

#### **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 següents xarxes:

- 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 la 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

### **Projectes i contractes actius**

La majoria de grups de recerca del Departament compten amb finançament del programa Suport de Grups Consolidats de la Generalitat de Catalunya. Durant el curs 2014/15 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 7PM
- Accions de cooperació internacional (Accions Integrades, Accions de Cooperació, COST)
- Programa ICREA Acadèmia
- Altres ajuts de la Generalitat de Catalunya
- ★ Altres ajuts de la URV
- Contractes amb empreses



#### 4.4.1 Projectes amb finançament públic

● Títol	Organometàl·lics i catàlisi homogènia
Investigador principal/ Grup	Maria del Carmen Orosia Claver Cabrero/OMICH
Organisme	AGAUR
Programa	Grups consolidats
Codi oficial	2014SGR670
Data d'inici	2014
Data de finalització	2016
● Títol	Zeptònic-plasmònica i ultradetecció
Investigador principal/ Grup	Ramon Angel Alvarez Puebla
Organisme	AGAUR
Programa	Grups consolidats
Codi oficial	2014SGR670
Data d'inici	2014
Data de finalització	2016
● Títol	Física i cristal·lografia de materials (FICMA)
Investigador principal/ Grup	Francisco Manuel Díaz González/FICMA-FICNA
Organisme	AGAUR
Programa	Grups consolidats
Codi oficial	2014SGR1358
Data d'inici	2014
Data de finalització	2016
● Títol	Química quàntica
Investigador principal/ Grup	Josep Maria Poblet
Organisme	AGAUR
Programa	Grups consolidats
Codi oficial	2014SGR199
Data d'inici	2014
Data de finalització	2016
● Títol	Materials catalítics en química verda (GreenCat)
Investigador principal/ Grup	Maria Pilar Salagre Carnero
Organisme	AGAUR
Programa	Grups consolidats
Codi oficial	2014SGR1146
Data d'inici	2014
Data de finalització	2016

● <b>Títol</b>	Processat digital de senyals en entorns aeroespacials i biomèdics (SPABE)
<b>Investigador principal/ Grup</b>	José Javier Ruiz Martí
<b>Organisme</b>	AGAUR
<b>Programa</b>	Grups consolidats
<b>Codi oficial</b>	2014SGR365
<b>Data d'inici</b>	2014
<b>Data de finalització</b>	2016

◆ <b>Títol</b>	Organometàl·lics i catàlisi homogènia
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Maria del Carmen Orosia Claver Cabrero/OMICH
<b>Organisme</b>	URV - Universitat Rovira i Virgili
<b>Programa</b>	Pla de Foment de la Recerca (URV)
<b>Codi oficial</b>	2014PFR-URV-B2-21
<b>Data d'inici</b>	2014
<b>Data de finalització</b>	2016
◆ <b>Títol</b>	Zeptònic-plasmònica i ultradetecció
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Ramon Angel Alvarez Puebla
<b>Organisme</b>	URV - Universitat Rovira i Virgili
<b>Programa</b>	Pla de Foment de la Recerca (URV)
<b>Codi oficial</b>	2014PFR-URV-B2-01
<b>Data d'inici</b>	2014
<b>Data de finalització</b>	2016
◆ <b>Títol</b>	Química quàntica
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Josep Maria Poblet Rius/QQ
<b>Organisme</b>	URV - Universitat Rovira i Virgili
<b>Programa</b>	Pla de Foment de la Recerca (URV)
<b>Codi oficial</b>	2014PFR-URV-B2-65
<b>Data d'inici</b>	2014
<b>Data de finalització</b>	2016
◆ <b>Títol</b>	Física i cristal·lografia de materials (FICMA)
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Francisco Manuel Díaz González
<b>Organisme</b>	URV - Universitat Rovira i Virgili
<b>Programa</b>	Pla de Foment de la Recerca (URV)
<b>Codi oficial</b>	2014PFR-URV-B2-28
<b>Data d'inici</b>	2014

<b>Data de finalització</b>	2016
◆ <b>Títol</b>	Materials catalítics en química verda (GreenCat)
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Maria Pilar Salagre Carnero
<b>Organisme</b>	URV - Universitat Rovira i Virgili
<b>Programa</b>	Pla de Foment de la Recerca (URV)
<b>Codi oficial</b>	2014PFR-URV-B2-76
<b>Data d'inici</b>	2014
<b>Data de finalització</b>	2016
◆ <b>Títol</b>	Processat digital de senyals en entorns aeroespacials i biomèdics (SPABE)
<b>Investigador principal/ Grup</b>	José Javier Ruiz Marti
<b>Organisme</b>	URV - Universitat Rovira i Virgili
<b>Programa</b>	Pla de Foment de la Recerca (URV)
<b>Codi oficial</b>	2014PFR-URV-B2-75
<b>Data d'inici</b>	2014
<b>Data de finalització</b>	2016

● <b>Títol</b>	Modelización computacional de compuestos de interés en nanociencia y catálisis: nucleación, confinamiento y reactividad
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Josep Maria Poblet Rius/QQ
<b>Codi oficial</b>	CTQ2011-29054-C02-01
<b>Convocatòria</b>	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals. Investigació fonamental no orientada.
<b>Programa</b>	Programa Nacional de Ciencias y Tecnologías Químicas
<b>Data d'inici</b>	01/01/2012
<b>Data de finalització</b>	31/12/2014
● <b>Títol</b>	Descripción ab initio de procesos fotoinducidos en complejos de metales de transición y compuestos orgánicos
<b>Investigador Principal/ Grup</b>	Cornelis De Graaf/QQ
<b>Codi oficial</b>	CTQ2011-23140
<b>Convocatòria</b>	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals. Investigació fonamental no orientada.
<b>Programa</b>	Programa Nacional de Ciencias y Tecnologías Químicas
<b>Data d'inici</b>	01/01/2012
<b>Data de finalització</b>	31/12/2014

<b>● Títol</b>	Nuevos lasers IR ultrarápidos y de alta potencia
<b>Investigador Principal/ Grup</b>	Magdalena Aguiló Díaz/FICNA
<b>Codi oficial</b>	MAT2011-29255-C02-02
<b>Convocatòria</b>	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals. Investigació fonamental no orientada.
<b>Programa</b>	Programa Nacional de ciencia y tecnología de materiales
<b>Data d'inici</b>	01/01/2012
<b>Data de finalització</b>	31/12/2014
<b>● Títol</b>	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)
<b>Investigador principal/ Grup</b>	María Pilar Salagre Carnero
<b>Codi oficial</b>	CTQ2011-24610
<b>Convocatòria</b>	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals. Investigació fonamental no orientada.
<b>Programa</b>	Programa Nacional de Ciencias y Tecnologías Químicas
<b>Data d'inici</b>	01/01/2012
<b>Data de finalització</b>	31/12/2014
<b>● Títol</b>	Computational modeling of compounds of interest in nanoscience and catalysis: nucleation, containment and reactivity
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Carles Bo Jané
<b>Codi oficial</b>	CTQ2011-29054-C02-02
<b>Convocatòria</b>	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals. Investigació fonamental no orientada.
<b>Programa</b>	Programa Nacional de Ciencias y Tecnologías Químicas
<b>Data d'inici</b>	01/01/2012
<b>Data de finalització</b>	31/12/2014
<b>● Títol</b>	Cooperación internacional en química. Explorando y controlando la reactividad de endofulerenos
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Josep Maria Poblet Rius
<b>Codi oficial</b>	PRI-PIBUS-2011-0995
<b>Convocatòria</b>	Programa Nacional d'Internacionalització de l'R+D. Subprograma de Projectes Internacionals. Modalitat B. Projectes d'investigació bilaterals. Estats Units: NSF

<b>Programa</b>	<b>Àrea Temàtica de Investigació Química Bàsica (CTQ-BQU)</b>
<b>Data d'inici</b>	01/01/2012
<b>Data de finalització</b>	30/11/2014
<b>● Títol</b>	Nanoestructuras multifuncionales para imagen y termoterapia controlada contra el cáncer
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Francesc Díaz González
<b>Codi oficial</b>	MAT2013-47395-C4-4-R
<b>Convocatòria</b>	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
<b>Programa</b>	
<b>Data d'inici</b>	01/01/2014
<b>Data de finalització</b>	31/12/2014
<b>● Títol</b>	Fotografiar moléculas organoboradas en estado líquido y estudiar su comportamiento dinámico mediante una película real
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Maria Elena Fernández Gutierrez
<b>Codi oficial</b>	CTQ2013-50219-EXP
<b>Convocatòria</b>	Projectes Explora Ciència/Tecnologia
<b>Programa</b>	
<b>Data d'inici</b>	01/09/2014
<b>Data de finalització</b>	31/08/2015
<b>● Títol</b>	Retos en la utilización de materias primas renovables: su eficientes transformación química mediante catálisis homogénea y nanocatálisis
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Carmen Claver
<b>Codi oficial</b>	CTQ2013-43438-R
<b>Convocatòria</b>	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals.
<b>Programa</b>	
<b>Data d'inici</b>	01/01/2014
<b>Data de vinalització</b>	31/12/2016
<b>● Títol</b>	Aproximaciones innovadoras para el descubrimiento sostenible y rentable de catalizadores quirales para química fina
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Montserrat Diéguez
<b>Codi oficial</b>	CTQ2013-40568-P
<b>Convocatòria</b>	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
<b>Programa</b>	
<b>Data d'Inici</b>	01/01/2014
<b>Data de finalització</b>	31/12/2016

● <b>Títol</b>	Construyendo funcionalidad mediante la química organoborada catalítica
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Elena Fernández
<b>Codi oficial</b>	CTQ2013-43395-P
<b>Convocatòria</b>	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals.
<b>Programa</b>	
<b>Data d'inici</b>	01/01/2014
<b>Data de finalització</b>	31/12/2016
● <b>Títol</b>	Nanomateriales moleculares para ayudar a la medicina molecular
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Maria Pilar Rivera Gil
<b>Codi oficial</b>	CTQ2013-45433-P
<b>Convocatòria</b>	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
<b>Programa</b>	
<b>Data d'inici</b>	01/01/2014
<b>Data de finalització</b>	31/12/2016

◆ <b>Títol</b>	Innovative synthesis in continuous-flow processes for sustainable chemical production
<b>participació/Grup</b>	Claver Cabrero, Maria del Carmen Orosia/OMICH
<b>Organisme</b>	Unió Europea
<b>Programa</b>	FP7 - Cooperation - Nanosciences, Nanotechnologies, Materials and New Production Technologies
<b>Codi oficial</b>	FP7-NMP-2009-LARGE-3
<b>Data d'inici</b>	01/09/2010
<b>Data de finalització</b>	31/08/2014
◆ <b>Títol</b>	Japanese-european de-icing aircraft collaborative exploration (JEDI ACE)
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Francesc Díaz González
<b>Organisme</b>	Unió Europea
<b>Programa</b>	FP7
<b>Codi oficial</b>	314335
<b>Data d'inici</b>	01/11/2012
<b>Data de finalització</b>	30/04/2016
◆ <b>Títol</b>	Small debris removal by laser illumination and complementary technologies
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Francesc Díaz González
<b>Organisme</b>	Unió Europea
<b>Programa</b>	FP7 – SPACE

<b>Codi oficial</b>	FP7-SPACE-2010-1-GA-263044
<b>Data d'inici</b>	01/06/2011
<b>Data de finalització</b>	31/05/2014
<b>◆ Títol</b>	Eco-friendly biorefinery fine chemicals from CO <sub>2</sub> photo-catalytic reduction
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Maria del Carmen Claver
<b>Organisme</b>	Unió Europea
<b>Programa</b>	FP7 – NMP-2012-SMALL-6
<b>Codi oficial</b>	
<b>Data d'inici</b>	
<b>Data de finalització</b>	
<b>◆ Títol</b>	SERS ultrasensitive universal sensing of proteins through cross-reactive sensor prove
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Ramon Angel Alvarez Puebla
<b>Organisme</b>	Unió Europea
<b>Programa</b>	FP7 – PEOPLE-2012-IEF
<b>Codi oficial</b>	329131
<b>Data d'inici</b>	
<b>Data de finalització</b>	
<b>◆ Títol</b>	Prion detection through organized arrays of gold nanorods as SERS substrates
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Ramon Angel Alvarez Puebla
<b>Organisme</b>	Unió Europea
<b>Programa</b>	FP7 – PEOPLE-2013-IEF
<b>Codi oficial</b>	623527
<b>Data d'inici</b>	01/04/2014
<b>Data de finalització</b>	31/03/2016

<b>● Títol</b>	European F-element network (EUFEN)
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Francesc Díaz
<b>Codi oficial</b>	CM1006
<b>Convocatòria</b>	COST
<b>Programa</b>	
<b>Data d'inici</b>	01/01/2011
<b>Data de finalització</b>	31/12/2013
<b>● Títol</b>	Polyoxometalate chemistry for molecular nanoscience (PoCheMoN)
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Josep Maria Poblet

<b>Codi oficial</b>	CM1203
<b>Convocatòria</b>	COST
<b>Programa</b>	
<b>Data d'inici</b>	01/01/2011
<b>Data de finalització</b>	31/12/2013
<b>● Títol</b>	Convergent distributed environment for computational spectroscopy (CODECS)
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Rosa Caballol Lorenzo
<b>Codi oficial</b>	CM 1002
<b>Convocatòria</b>	COST
<b>Programa</b>	
<b>Data d'inici</b>	21/11/2010
<b>Data de finalització</b>	21/11/2014
<b>● Títol</b>	Catalytic routines for small molecule activation (CARISMA)
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Montserrat Dieguez Fernandez
<b>Codi oficial</b>	CM1205
<b>Convocatòria</b>	COST
<b>Programa</b>	
<b>Data d'inici</b>	2013
<b>Data de finalització</b>	2017
<b>● Títol</b>	The European Upconversion Network: from the design of photon-upconverting nanomaterials to (biomedical) applications
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Francesc Díaz González
<b>Organisme</b>	Unió Europea
<b>Programa</b>	COST domain: Chemistry and Molecular Sciences and Technologies (CMST)
<b>Codi oficial</b>	CM1403
<b>Data d'inici</b>	19/11/2014
<b>Data de finalització</b>	18/11/2018

<b>■ Títol</b>	Programa ICREA Acadèmia 2010
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Oscar Pàmies/OMICH
<b>Organisme</b>	Generalitat
<b>Programa</b>	Intensificació de la Recerca
<b>Codi oficial</b>	2010ICREA-01
<b>Data d'inici</b>	01/01/2011



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

<b>■ Títol</b>	Magnetic materials: molecules, clusters and extended systems. A quantum chemical approach
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Rosa Caballol Lorenzo
<b>Organisme</b>	ICREA
<b>Programa</b>	ICREA-Investigador ICREA SÈNIOR/JÚNIOR. ICREA
<b>Codi oficial</b>	2010ICREA-01
<b>Data d'inici</b>	01/01/2014
<b>Data de finalització</b>	31/12/2014
<b>■ Títol</b>	Ajut pont tesi doctoral: Oleksandr Bilousov
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Joan Josep Carvajal Marti
<b>Organisme</b>	Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació. Generalitat de Catalunya
<b>Programa</b>	FI-Ajut pont FI. DIUE
<b>Codi oficial</b>	2014PONT/FI/06
<b>Data d'inici</b>	10/11/2014
<b>Data de finalització</b>	10/11/2014
<b>■ Títol</b>	Mid-infrared integrated optical sensors
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Airan Rodenas Segui
<b>Organisme</b>	Departament d'Economia i Coneixement. Generalitat de Catalunya

<b>Programa</b>	FIB-Ajuts per Contractar Personal Investigador Novell. Modalitat B. DIUE
<b>Codi oficial</b>	2014FI_B 00274
<b>Data d'inici</b>	01/02/2014
<b>Data de finalització</b>	31/01/2017
<b>■ Títol</b>	Formation, evolution and physical properties of carbon nanoforms
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Josep Maria Poblet Rius
<b>Organisme</b>	Departament d'Economia i Coneixement. Generalitat de Catalunya
<b>Programa</b>	FIB-Ajuts per contractar a personal investigador novell. Modalitat B. DIUE
<b>Codi oficial</b>	2014FI_B 00779
<b>Data d'inici</b>	01/02/2014
<b>Data de finalització</b>	31/01/2017
<b>■ Títol</b>	Synthesis and characterization of nanocrystals with scintillation properties
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Maria Rosa Solé Cartaña
<b>Organisme</b>	Departament d'Economia i Coneixement. Generalitat de Catalunya
<b>Programa</b>	FIB-Ajuts per Contractar Personal Investigador Novell. Modalitat B. DIUE
<b>Codi oficial</b>	2015FI_B 00711
<b>Data d'inici</b>	01/02/2015
<b>Data de finalització</b>	31/01/2018
<b>■ Títol</b>	Rational design of nanoclusters for biomedical applications
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Maria del Carmen Claver Cabrero
<b>Organisme</b>	Agència de Suport a l'Empresa Catalana (ACC1Ó)
<b>Programa</b>	Ajuts TECNIO, per a la mobilitat de personal investigador (TECNIOSPRING)
<b>Codi oficial</b>	TECSPR14-1-0053
<b>Data d'inici</b>	01/11/2014
<b>Data de finalització</b>	30/10/2016
<b>■ Títol</b>	Sustainable production of valuable chemicals under continuous flow conditions
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Maria del Carmen Claver Cabrero
<b>Organisme</b>	Agència de Suport a l'Empresa Catalana (ACC1Ó)

<b>Programa</b>	Ajuts TECNIO, per a la mobilitat de personal investigador (TECNIOSPRING)
<b>Codi oficial</b>	TECSPR14-1-0045
<b>Data d'inici</b>	01/11/2014
<b>Data de finalització</b>	30/10/2016
<b>■ Títol</b>	Efficient synthesis of highly functionalized compounds of industrial-thierry león
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Maria Elena Fernandez Gutierrez
<b>Organisme</b>	Agència de Suport a l'Empresa Catalana (ACC1Ó)
<b>Programa</b>	Ajuts TECNIO, per a la mobilitat de personal investigador (TECNIOSPRING)
<b>Codi oficial</b>	TECSPR13-1-0040
<b>Data d'inici</b>	01/05/2014
<b>Data de finalització</b>	30/04/2016

<b>★ Títol</b>	Nanocavidades de silicio como potenciador Mie para espectroscopia Raman amplificada por superficies (SERS) // Sonda y sustrato para espectroscopia de dispersión raman, procedimiento de preparación y uso
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Ramon Angel Alvarez Puebla
<b>Organisme</b>	URV
<b>Programa</b>	PAT-Gestió patents. UROV
<b>Codi oficial</b>	2013PAT-11
<b>Data d'inici</b>	17/02/2014
<b>Data de finalització</b>	17/02/2014
<b>★ Títol</b>	Nanocavidades de silicio como potenciador Mie para espectroscopia Raman amplificada por superficies (SERS) // Sonda y sustrato para espectroscopia de dispersion raman, procedimiento de preparación y uso
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Ramon Angel Alvarez Puebla
<b>Organisme</b>	URV
<b>Programa</b>	PAT-Gestió Patents. UROV
<b>Codi oficial</b>	2013PAT-11
<b>Data d'inici</b>	25/07//2014
<b>Data de finalització</b>	25/07/2014
<b>★ Títol</b>	Dispositiu acoblable per a microscopi òptic per la determinació de temperatura de forma remota, a temps real, mitjançant medis òptics i luminescents

<b>Investigador principal/ Grup</b>	Jaume Masons Bosch
<b>Organisme</b>	URV
<b>Programa</b>	PAT-Gestió Patents. UROV
<b>Codi oficial</b>	2013PAT-22
<b>Data d'inici</b>	16/04//2014
<b>Data de finalització</b>	16/04/2014
<b>★ Títol</b>	Dispositiu acoblable per a microscopi òptic per la determinació de temperatura de forma remota, a temps real, mitjançant medis òptics i luminescents
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Jaume Masons Bosch
<b>Organisme</b>	URV
<b>Programa</b>	PAT-Gestió Patents. UROV
<b>Codi oficial</b>	2013PAT-22
<b>Data d'inici</b>	22/09/2014
<b>Data de finalització</b>	22/09/2014
<b>★ Títol</b>	Sensor óptico, sistema y procedimiento para detectar la presencia de hielo en superficies
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Francisco Manuel Díaz González
<b>Organisme</b>	URV
<b>Programa</b>	PAT-Gestió Patents. UROV
<b>Codi oficial</b>	2014PAT-08
<b>Data d'inici</b>	17/03/2014
<b>Data de finalització</b>	17/03/2014
<b>★ Títol</b>	Laboral grup I
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Carmen Claver Cabrero
<b>Organisme</b>	URV
<b>Programa</b>	PSR-Personal Tècnic de Suport a la Recerca. Consolidació. UROV
<b>Codi oficial</b>	2008PSR/C01
<b>Data d'inici</b>	01/10/2014
<b>Data de finalització</b>	30/09/2015
<b>★ Títol</b>	Laboral grup III
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Francisco Manuel Díaz González
<b>Organisme</b>	URV
<b>Programa</b>	PSR-Personal Tècnic de Suport a la Recerca. Consolidació. UROV
<b>Codi oficial</b>	2006PSR/C04

<b>Data d'inici</b>	01/10/2014
<b>Data de finalització</b>	30/09/2015
<b>★ Títol</b>	Laboral grup III
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Rosa Caballol lorenzo
<b>Organisme</b>	URV
<b>Programa</b>	PSR-Personal Tècnic de Suport a la Recerca. Consolidació. UROV
<b>Codi oficial</b>	2005PSR/C14
<b>Data d'inici</b>	01/10/2014
<b>Data de finalització</b>	30/09/2015
<b>★ Títol</b>	Laboral grup III
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Magdalena Aguiló Díaz
<b>Organisme</b>	URV
<b>Programa</b>	PSR-Personal Tècnic de Suport a la Recerca. Consolidació. UROV
<b>Codi oficial</b>	2010PSR/C01
<b>Data d'inici</b>	01/10/2014
<b>Data de finalització</b>	30/09/2015
<b>★ Títol</b>	Professor distingit de la URV: Reducció docent
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Magdalena Aguiló Díaz
<b>Organisme</b>	URV
<b>Programa</b>	PDU-Programa de Professor Distingit de la URV. UROV
<b>Codi oficial</b>	2014PDU/21
<b>Data d'inici</b>	01/01/2014
<b>Data de finalització</b>	31/12/2014
<b>★ Títol</b>	Professor distingit de la URV: Reducció docent
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Josep Maria Poblet Rius
<b>Organisme</b>	URV
<b>Programa</b>	PDU-Programa de Professor Distingit de la URV. UROV
<b>Codi oficial</b>	2014PDU/28
<b>Data d'inici</b>	01/01/2014
<b>Data de finalització</b>	31/12/2014
<b>★ Títol</b>	Subvenció al Departament per Investigadors Actius al 2014
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Química Física i Inorgànica, Departament

<b>Organisme</b>	URV
<b>Programa</b>	Investigador Actiu. UROV
<b>Codi oficial</b>	IA2014-23
<b>Data d'inici</b>	01/01/2014
<b>Data de finalització</b>	31/12/2014

#### 4.4.2 Contractes amb empreses

<b>● Títol</b>	Addenda: Síntesis de Nanoclústers de Au y Estudio de sus Propiedades Fotoquímicas para su Aplicación en la Remediación Medioambiental
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Maria Elena Fernández Guterrez
<b>Codi oficial</b>	TQC14026S
<b>Data d'inici</b>	01/05/2014
<b>Data de finalització</b>	31/12/2015
<b>● Títol</b>	Ensayos de Difusión de Cesión en Discos de Mortero El Cabril Sumergidos en Polvo de Grafito
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Francisco Manuel Díaz González
<b>Codi oficial</b>	T14021S
<b>Data d'inici</b>	01/02/2014
<b>Data de finalització</b>	30/09/2014
<b>● Títol</b>	Estudio de Catalizadores para Reacciones de Polieterificación
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Maria Elena Fernández Guterrez
<b>Codi oficial</b>	TQC14006S
<b>Data d'inici</b>	01/02/2014
<b>Data de finalització</b>	30/04/2014
<b>● Títol</b>	Estudio de Catalizadores para Reacciones de Polieterificación
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Maria Elena Fernández Guterrez
<b>Codi oficial</b>	TQC14020S
<b>Data d'inici</b>	01/05/2014
<b>Data de finalització</b>	31/07/2014
<b>● Títol</b>	Addenda. Telomerisation of Isoprene
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Cyril Godard
<b>Codi oficial</b>	TQC14017S
<b>Data d'inici</b>	01/02/2014

<b>Data de finalització</b>	31/01/2015
● <b>Títol</b>	Desenvolupament de Nous Sensors Òptics per a Diagnòstics i Biodetecció
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Ramon Angel Alvarez Puebla
<b>Codi oficial</b>	TQC14011S
<b>Data d'inici</b>	06/02/2014
<b>Data de finalització</b>	05/02/2015
● <b>Títol</b>	Análisis y Caracterización de Polioles Producidos en Planta de Repsol Química
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Cyril Godard
<b>Codi oficial</b>	TQC14016S
<b>Data d'inici</b>	01/04/2014
<b>Data de finalització</b>	30/09/2014
● <b>Títol</b>	Diferentes Grados Depolipropilenocarbonato y Desarrollo (Síntesis y Tests) de Catalizadores (Salvando Patentes Actuales) para su Obtención
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Cyril Godard
<b>Codi oficial</b>	TQC14029S
<b>Data d'inici</b>	15/07/2014
<b>Data de finalització</b>	31/12/2015
● <b>Títol</b>	XXXII Congreso GEQO. Reunión del Grupo Especializado de Química Organometálica
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Maria Elena Fernández Guterrez
<b>Codi oficial</b>	F14010N
<b>Data d'inici</b>	17/09/2014
<b>Data de finalització</b>	19/09/2014
● <b>Títol</b>	Programa conjunt de beques de personal investigador en formació. 1 beca a l'àmbit del Patrimoni i la Cultura.
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Carmen Claver Cabrero
<b>Codi Oficial</b>	FC006363
<b>Data d'inici</b>	01/10/2014
<b>Data de finalització</b>	30/09/2017

● <b>Títol</b>	Contracte d'un estudiant de doctorat per al Pla de Doctorats Industrials de la Generalitat de Catalunya, així com per establir les condicions per al progrés acadèmic d'aquest estudiant i l'elaboració conjunta del projecte de recerca: Materials Intel·ligents per a la Detecció d'Infeccions i Alliberament Controlat de Medicaments en Pròtesis
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Ramon Angel Alvarez Puebla
<b>Codi oficial</b>	Doctorat Industrial-14/04
<b>Data d'inici</b>	19/03/2015
<b>Data de finalització</b>	18/03/2018
● <b>Títol</b>	Contracte d'un estudiant de doctorat per al Pla de Doctorats Industrials de la Generalitat de Catalunya, així com per establir les condicions per al progrés acadèmic d'aquest estudiant i l'elaboració conjunta del projecte de recerca: Detection of DNA lesions and mutations by Surface-enhanced Raman Scattering (SERS) Spectroscopy
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Ramon Angel Alvarez Puebla
<b>Codi oficial</b>	Doctorat Industrial-14/05
<b>Data d'inici</b>	19/03/2015
<b>Data de finalització</b>	18/03/2018
● <b>Títol</b>	Contracte d'un estudiant de doctorat per al Pla de Doctorats Industrials de la Generalitat de Catalunya, així com per establir les condicions per al progrés acadèmic d'aquest estudiant i l'elaboració conjunta del projecte de recerca: Control of Intracellular Ion Homeostasis Is Essential for All Cellular Organisms
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Ramon Angel Alvarez Puebla
<b>Codi oficial</b>	Doctorat Industrial-14/06
<b>Data d'inici</b>	19/03/2015
<b>Data de finalització</b>	18/03/2018
● <b>Títol</b>	Contracte d'un estudiant de doctorat per al Pla de Doctorats Industrials de la Generalitat de Catalunya, així com per establir les condicions per al progrés acadèmic d'aquest estudiant i l'elaboració conjunta del projecte de recerca: Synthesis of Highly Active Hybrid Materials for Sensing Applications
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Ramon Angel Alvarez Puebla
<b>Codi oficial</b>	Doctorat Industrial-14/07
<b>Data d'inici</b>	19/03/2015



<b>Data de finalització</b>	18/03/2018
<b>● Títol</b>	Contracte d'un estudiant de doctorat per al Pla de Doctorats Industrials de la Generalitat de Catalunya, així com per establir les condicions per al progrés acadèmic d'aquest estudiant i l'elaboració conjunta del projecte de recerca: Desenvolupament de Nova Nanometria Espectral a partir de Nanopartícules Luminiscentes
<b>Investigador principal/ Grup</b>	Francisco Manuel Díaz González
<b>Codi oficial</b>	Doctorat Industrial-14/03
<b>Data d'inici</b>	19/03/2015
<b>Data de finalització</b>	18/03/2018

### Col·laboracions internacionals

1. Institut Charles Gerhardt-CTMM- Université de Montpellier 2 -CNRS, Montpellier (França)
2. Universitat P. Sabatier, Tolosa (França)
3. Institute Néel – CNRS, Grenoble (França)
4. Laboratoire des Matériaux Inorganiques Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand (França)
5. Université Louis Pasteur, Estrasburg (França)
6. Université Claude Bernard, Lió (França)
7. Università degli Studi di Milano-Bicocca (Itàlia)
8. Università degli Studi di Genova (Itàlia)
9. Dipartimento Scientifico e Tecnologico, Univ. Verona (Itàlia)
10. Università de Trieste (Itàlia)
11. Centre Nano-SISTEMI, Alessandria (Itàlia)
12. Imperial College, Londres (Regne Unit)
13. Dyson Perry Labs. Oxford (Regne Unit)
14. Materials and engineering research, Hallam University, Sheffield (Regne Unit)
15. University of Durham (Regne Unit)
16. University of Glasgow (Regne Unit)
17. University of California, Davis (EUA)
18. Florida State University (EUA)

19. State University of New York, Stony Brook (EUA)
20. University of Clemson (EUA)
21. Max Born Institute, Berlín (Alemanya)
22. University of Würzburg, Würzburg (Alemanya)
23. University of Bielefeld (Alemanya)
24. Jacobs University Bremen (Alemanya)
25. RWTH Aachen University (Alemanya)
26. Advanced Photonics Laboratory, Institute of Imaging and Applied Optics, École Polytechnique Fédérale, Lausana (Suïssa)
27. Laser physics, KTH – Royal Institute of Technology de Stockholm (Suècia)
28. Polish Academy of Sciences, Breslau (Polònia)
29. Queen's University (Canadà)
30. Mount Alison University (Canadà)
31. Université de Sherbrooke (Canadà)
32. UNAM (Mèxic)
33. University College Dublin (Irlanda)
34. University of Cork – Tyndall National Institute (Irlanda)
35. University of Graz (Àustria)
36. Academy of Science (Rússia)
37. Abdelmalek Esaadi Tetuan (Marroc)
38. Universidad de Concepción (Xile)
39. Technische Universiteit Eindhoven (Holanda)
40. University of Southampton (Regne Unit)
41. Anjou Univeristy (Corea)
42. Laboratoire de Matériaux et Catalyse, Université Djillali Labbes (Algèria)
43. Stockholm University (Suècia)

**Sortides de recerca i transferència: tesis, publicacions, congressos, etc.**

S'han publicat, durant l'any 2014, 88 publicacions, articles i revisions en revistes d'àmbit internacional, 84 de les quals en revistes indexades en SCI, i s'han presentat un gran nombre de comunicacions a congressos nacionals i internacionals.

## Publicacions en revistes internacionals

Aguado-Ullate, S.; Baker, J. A.; Gonzalez-Gonzalez, V.; Mueller, C.; Hirst, J. D.; Carbo, J. J., A theoretical study of the activity in Rh-catalysed hydroformylation: the origin of the enhanced activity of the pi-acceptor phosphinine ligand. *Catalysis Science & Technology* **2014**, 4 (4), 979-987.

Alegre, S.; Alberico, E.; Pamies, O.; Dieguez, M., Rh-catalyzed asymmetric hydrogenation using a furanoside monophosphite second-generation ligand library: scope and limitations. *Tetrahedron-Asymmetry* **2014**, 25 (3), 258-262.

Aleksandrov, V.; Gluth, A.; Petrov, V.; Buchvarov, I.; Choi, S. Y.; Kim, M. H.; Rothermund, F.; Mateos, X.; Diaz, F.; Griebner, U., Tm,Ho:KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> laser mode-locked near 2 μm by single-walled carbon nanotubes. *Optics Express* **2014**, 22 (22), 26788-26793.

Asara, G. G.; Roldan, A.; Ricart, J. M.; Rodriguez, J. A.; Illas, F.; de Leeuw, N. H., New Insights into the Structure of the C-Terminated beta-Mo<sub>2</sub>C (001) Surface from First-Principles Calculations. *Journal of Physical Chemistry C* **2014**, 118 (33), 19224-19231.

Baltrusaitis, J.; Patterson, E.; de Graaf, C.; Broer, R., H<sub>2</sub>S as reactive hydrogen source. *Abstracts of Papers of the American Chemical Society* **2014**, 247.

Barats-Damatov, D.; Shimon, L. J. W.; Weiner, L.; Schreiber, R. E.; Jimenez-Lozano, P.; Poblet, J. M.; de Graaf, C.; Neumann, R., Dicobalt-mu-oxo Polyoxometalate Compound, (alpha(2)-P<sub>2</sub>W<sub>17</sub>O<sub>61</sub>Co)<sub>2</sub>O (14-): A Potent Species for Water Oxidation, C-H Bond Activation, and Oxygen Transfer. *Inorganic Chemistry* **2014**, 53 (3), 1779-1787.

Barrera, E. W.; Pujol, M. C.; Carvajal, J. J.; Mateos, X.; Sole, R.; Massons, J.; Speghini, A.; Bettinelli, M.; Cascales, C.; Aguilo, M.; Diaz, F., Upconversion emission in (Ln,Yb):KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> nanocrystals for white light generation. *21st Latin American Symposium on Solid State Physics (Slafes Xxi)* **2014**, 480.

Barrera, E. W.; Pujol, M. C.; Carvajal, J. J.; Mateos, X.; Sole, R.; Massons, J.; Speghini, A.; Bettinelli, M.; Cascales, C.; Aguilo, M.; Diaz, F., White light upconversion in Yb-sensitized (Tm, Ho)-doped KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> nanocrystals: the effect of Eu incorporation. *Physical Chemistry Chemical Physics* **2014**, 16 (4), 1679-1686.

Bastien, G.; Lemouchi, C.; Allain, M.; Wzietek, P.; Rodriguez-Forteza, A.; Canadell, E.; Iliopoulos, K.; Gindre, D.; Chrysos, M.; Batail, P., Changing gears to neutral in a polymorph of one-dimensional arrays of cogwheel-like pairs of molecular rotors. *Crystengcomm* **2014**, 16 (7), 1241-1244.

Bastien, G.; Lemouchi, C.; Wzietek, P.; Simonov, S.; Zorina, L.; Rodriguez-Forteza, A.; Canadell, E.; Batail, P., A Crystalline Hybrid of Paddlewheel Copper(II) Dimers and Molecular Rotors: Singlet-triplet Dynamics Revealed by Variable-temperature Proton Spin-lattice Relaxation. *Zeitschrift Fur Anorganische Und Allgemeine Chemie* **2014**, 640 (6), 1127-1133.

Bilousov, O. V.; Carvajal, J. J.; Geaney, H.; Zubiaevich, V. Z.; Parbrook, P. J.; Martinez, O.; Jimenez, J.; Diaz, F.; Aguilo, M.; O'Dwyer, C., Fully Porous GaN p-n

Junction Diodes Fabricated by Chemical Vapor Deposition. *ACS Applied Materials & Interfaces* **2014**, 6 (20), 17954-17964.

Bilousov, O. V.; Carvajal, J. J.; Mena, J.; Martinez, O.; Jimenez, J.; Geaney, H.; Diaz, F.; Aguilo, M.; O'Dwyer, C., Epitaxial growth of (0001) oriented porous GaN layers by chemical vapour deposition. *Crystengcomm* **2014**, 16 (44), 10255-10261.

Bilousov, O. V.; Carvajal, J. J.; Vilalta-Clemente, A.; Ruterana, P.; Diaz, F.; Aguilo, M.; O'Dwyer, C., Porous GaN and High-kappa MgO-GaN MOS Diode Layers Grown in a Single Step on Silicon. *Chemistry of Materials* **2014**, 26 (2), 1243-1249.

Busche, C.; Vila-Nadal, L.; Yan, J.; Miras, H. N.; Long, D.-L.; Georgiev, V. P.; Asenov, A.; Pedersen, R. H.; Gadegaard, N.; Mirza, M. M.; Paul, D. J.; Poblet, J. M.; Cronin, L., Design and fabrication of memory devices based on nanoscale polyoxometalate clusters. *Nature* **2014**, 515 (7528), 545-549.

Calow, A. D. J.; Carbo, J. J.; Cid, J.; Fernandez, E.; Whiting, A., Understanding alpha,beta-Unsaturated Imine Formation from Amine Additions to alpha,beta-Unsaturated Aldehydes and Ketones: An Analytical and Theoretical Investigation. *Journal of Organic Chemistry* **2014**, 79 (11), 5163-5172.

Calow, A. D. J.; Fernandez, E.; Whiting, A., Total synthesis of fluoxetine and duloxetine through an in situ imine formation/borylation/transimination and reduction approach. *Organic & Biomolecular Chemistry* **2014**, 12 (32), 6121-6127.

Campos-Carrasco, A.; Bruce, M.; Reguero, M.; Masdeu-Bulto, A. M., Pd(II) complexes with 3,3'-substituted bipyridine ligands: Synthesis, crystal structure, DFT calculations and catalytic studies in compressed carbon dioxide. *Inorganica Chimica Acta* **2014**, 409, 285-295.

Carvajal, J. J.; Kumar, G. R.; Massons, J.; Vazquez de Aldana, J. R.; Gallardo, I.; Moreno, P.; Roso, L.; Diaz, F.; Aguilo, M., Formation of polycrystalline TiO<sub>2</sub> on the ablated surfaces of RbTiOPO<sub>4</sub> single crystals by thermal annealing. *Crystengcomm* **2014**, 16 (20), 4281-4288.

Choi, S. Y.; Kim, J. W.; Kim, M. H.; Yeom, D.-I.; Hong, B. H.; Mateos, X.; Aguilo, M.; Diaz, F.; Petrov, V.; Griebner, U.; Rotermund, F., Carbon nanostructure-based saturable absorber mirror for a diode-pumped 500-MHz femtosecond Yb:KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> laser. *Optics Express* **2014**, 22 (13), 15626-15631

Cid, J.; Carbo, J. J.; Fernandez, E., A Clear-Cut Example of Selective Bpin - Bdan Activation and Precise Bdan Transfer on Boron Conjugate Addition. *Chemistry-a European Journal* **2014**, 20 (13), 3616-3620.

Cinta Pujol, M.; Maitre, A.; Carreaud, J.; Boulesteix, R.; Brenier, A.; Alombert-Goget, G.; Guyot, Y.; Josep Carvajal, J.; Maria Sole, R.; Massons, J.; Oleaga, A.; Salazar, A.; Gallardo, I.; Moreno, P.; Rodriguez Vazquez de Aldana, J.; Aguilo, M.; Diaz, F., Thermal and Optical Characterization of Undoped and Neodymium-Doped Y<sub>3</sub>ScAl<sub>4</sub>O<sub>12</sub> Ceramics. *Journal of Physical Chemistry C* **2014**, 118 (25), 13781-13789.

Coll, M.; Pamies, O.; Dieguez, M., Highly Versatile Pd-Thioether-Phosphite Catalytic Systems for Asymmetric Allylic Alkylation, Amination, and Etherification Reactions. *Organic Letters* **2014**, 16 (7), 1892-1895.

- Coll, M.; Pamies, O.; Dieguez, M., Modular Hydroxyamide and Thioamide Pyranoside-Based Ligand Library from the Sugar Pool: New Class of Ligands for Asymmetric Transfer Hydrogenation of Ketones. *Advanced Synthesis & Catalysis* **2014**, *356* (10), 2293-2302.
- Cuesta-Aluja, L.; Djoufak, M.; Aghmiz, A.; Rivas, R.; Christ, L.; Masdeu-Bulto, A. M., Novel chromium (III) complexes with N-4-donor ligands as catalysts for the coupling of CO<sub>2</sub> and epoxides in supercritical CO<sub>2</sub>. *Journal of Molecular Catalysis a-Chemical* **2014**, *381*, 161-170.
- de Graaf, C.; Reguero, M., Methods for Describing Open-Shell Systems: Following the Trail of Rosa Caballol's Research. *International Journal of Quantum Chemistry* **2014**, *114* (8), 481-492.
- Di Trapani, F.; Mateos, X.; Petrov, V.; Agnesi, A.; Griebner, U.; Zhang, H.; Wang, J.; Yu, H., Continuous-wave laser performance of Tm:LuVO<sub>4</sub> under Ti:sapphire laser pumping. *Laser Physics* **2014**, *24* (3).
- Dolores Gonzalez, M.; Salagre, P.; Linares, M.; Garcia, R.; Serrano, D.; Cesteros, Y., Effect of hierarchical porosity and fluorination on the catalytic properties of zeolite beta for glycerol etherification. *Applied Catalysis a-General* **2014**, *473*, 75-82.
- Dolores Gonzalez, M.; Salagre, P.; Mokaya, R.; Cesteros, Y., Tuning the acidic and textural properties of ordered mesoporous silicas for their application as catalysts in the etherification of glycerol with isobutene. *Catalysis Today* **2014**, *227*, 171-178.
- Domingo, A.; Sousa, C.; de Graaf, C., The effect of thermal motion on the electron localization in metal-to-ligand charge transfer excitations in Fe(bpy)<sub>3</sub> (2+). *Dalton Transactions* **2014**, *43* (47), 17838-17846.
- Dunk, P. W.; Mulet-Gas, M.; Nakanishi, Y.; Kaiser, N. K.; Rodriguez-Forteza, A.; Shinohara, H.; Poblet, J. M.; Marshall, A. G.; Kroto, H. W., Bottom-up formation of endohedral mono-metallofullerenes is directed by charge transfer. *Nature Communications* **2014**, *5*.
- Farokhipoor, S.; Magen, C.; Venkatesan, S.; Iniguez, J.; Daumont, C. J. M.; Rubi, D.; Snoeck, E.; Mostovoy, M.; de Graaf, C.; Mueller, A.; Doeblinger, M.; Scheu, C.; Noheda, B., Artificial chemical and magnetic structure at the domain walls of an epitaxial oxide. *Nature* **2014**, *515* (7527), 379-+.
- Fernandez, E.; Guiry, P. J.; Connole, K. P. T.; Brown, J. M., Quinap and Congeners: Atropis PN ligands for Asymmetric Catalysis. *Journal of Organic Chemistry* **2014**, *79* (12), 5391-5400.
- Fernandez-Alvarez, V. M.; de la Fuente, V.; Godard, C.; Castillon, S.; Claver, C.; Maseras, F.; Carbo, J. J., Pd-Catalysed Mono- and Dicarbonylation of Aryl Iodides: Insights into the Mechanism and the Selectivity. *Chemistry-a European Journal* **2014**, *20* (35), 10982-10989.
- Garcia-Rates, M.; Miro, P.; Mueller, A.; Bo, C.; Bonet Avalos, J., Encapsulated Water Inside Mo-132 Capsules: The Role of Long-Range Correlations of about 1 nm. *Journal of Physical Chemistry C* **2014**, *118* (10), 5545-5555.

Gebretsadik, F. B.; Salagre, P.; Cesteros, Y., Use of polymer as template in microwave synthesis of saponite. Study of several factors of influence. *Applied Clay Science* **2014**, *87*, 170-178.

Ghisolfi, A.; Monakhov, K. Y.; Pattacini, R.; Braunstein, P.; Lopez, X.; de Graaf, C.; Speldrich, M.; van Leusen, J.; Schilder, H.; Koegerler, P., A comparative synthetic, magnetic and theoretical study of functional M<sub>4</sub>Cl<sub>4</sub> cubane-type Co(II) and Ni(II) complexes. *Dalton Transactions* **2014**, *43* (21), 7847-7859.

Giacomo Asara, G.; Vines, F.; Ricart, J. M.; Rodriguez, J. A.; Illas, F., When reconstruction comes around: Ni, Cu, and Au adatoms on delta-MoC(001). *Surface Science* **2014**, *624*, 32-36.

Goberna-Ferron, S.; Pena, B.; Soriano-Lopez, J.; Carbo, J. J.; Zhao, H.; Poblet, J. M.; Dunbar, K. R.; Ramon Galan-Mascaros, J., A fast metal-metal bonded water oxidation catalyst. *Journal of Catalysis* **2014**, *315*, 25-32.

Granados-Reyes, J.; Salagre, P.; Cesteros, Y., Effect of microwaves, ultrasounds and interlayer anion on the hydrocalumites synthesis. *Microporous and Mesoporous Materials* **2014**, *199*, 117-124.

Huertos, M. A.; Cano, I.; Bandeira, N. A. G.; Benet-Buchholz, J.; Bo, C.; van Leeuwen, P. W. N. M., Phosphinothiolates as Ligands for Polyhydrido Copper Nanoclusters. *Chemistry-a European Journal* **2014**, *20* (49), 16121-16127.

Huertos, M. A.; Cano, I.; Bandeira, N. A. G.; Benet-Buchholz, J.; Bo, C.; van Leeuwen, P. W. N. M., Phosphinothiolates as ligands for polyhydrido copper nanoclusters. *Chemistry (Weinheim an der Bergstrasse, Germany)* **2014**, *20* (49), 16013-16013.

Iksi, S.; Aghmiz, A.; Rivas, R.; Dolores Gonzalez, M.; Cuesta-Aluja, L.; Castilla, J.; Orejon, A.; El Guemmout, F.; Masdeu-Bulto, A. M., Chromium complexes with tridentate NN' O Schiff base ligands as catalysts for the coupling of CO<sub>2</sub> and epoxides. *Journal of Molecular Catalysis a-Chemical* **2014**, *383*, 143-152.

Jambunathan, V.; Mateos, X.; Pujol, M. C.; Carvajal, J. J.; Zaldo, C.; Griebner, U.; Petrov, V.; Aguilo, M.; Diaz, F., Crystal growth, optical spectroscopy, and continuous-wave laser operation of Ho:KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> crystals. *Applied Physics B-Lasers and Optics* **2014**, *116* (2), 455-466.

Jambunathan, V.; Schmidt, A.; Mateos, X.; Pujol, M. C.; Griebner, U.; Petrov, V.; Zaldo, C.; Aguilo, M.; Diaz, F., Crystal growth, optical spectroscopy, and continuous-wave laser operation of co-doped (Ho, Tm):KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> monoclinic crystals. *Journal of the Optical Society of America B-Optical Physics* **2014**, *31* (7), 1415-1421.

Jimenez-Lozano, P.; Carbo, J. J.; Chaumont, A.; Poblet, J. M.; Rodriguez-Forteza, A.; Wipff, G., Nature of Zr-Monosubstituted Monomeric and Dimeric Polyoxometalates in Water Solution at Different pH Conditions: Static Density Functional Theory Calculations and Dynamic Simulations. *Inorganic Chemistry* **2014**, *53* (2), 778-786.

Krinsky, J. L.; Martinez, A.; Godard, C.; Castillon, S.; Claver, C., Modular Synthesis of Functionalizable Alkoxy-Tethered N-Heterocyclic Carbene Ligands and an Ac-

tive Catalyst for Buchwald-Hartwig Aminations. *Advanced Synthesis & Catalysis* **2014**, 356 (2-3), 460-4

Lemouchi, C.; Yamamoto, H. M.; Kato, R.; Simonov, S.; Zorina, L.; Rodriguez-Fortea, A.; Canadell, E.; Wzietek, P.; Iliopoulos, K.; Gindre, D.; Chrysos, M.; Batail, P., Reversible Control of Crystalline Rotors by Squeezing Their Hydrogen Bond Cloud Across a Halogen Bond-Mediated Phase Transition. *Crystal Growth & Design* **2014**, 14 (7), 3375-3383.

Liu, H.; Vazquez de Aldana, J. R.; Aguilo, M.; Diaz, F.; Chen, F.; Rodenas Segui, A., Femtosecond laser-written double-cladding waveguides in Nd:GdVO<sub>4</sub> crystal: Raman analysis, guidance, and lasing. *Optical Engineering* **2014**, 53 (9).

Llop Castellbou, J.; Bresó-Femenia, E.; Blondeau, P.; Chaudret, B.; Castillon, S.; Claver, C.; Godard, C., Tuning the Selectivity in the Hydrogenation of Aromatic Ketones Catalyzed by Similar Ruthenium and Rhodium Nanoparticles. *Chemcatchem* **2014**, 6 (11), 3160-3168.

Llor, C.; Maria Cots, J.; Hernandez, S.; Ortega, J.; Arranz, J.; Jose Monedero, M.; de Dios Alcantara, J.; Perez, C.; Garcia, G.; Gomez, M.; Guerra, G.; Cid, M.; Luisa Ciguenza, M.; Pineda, V.; Paredes, J.; Luis Burgazzoli, J.; Munck, A.; Cordoba-Currea, G.; Bjerrum, L.; Happy Audit Study, G., Effectiveness of two types of intervention on antibiotic prescribing in respiratory tract infections in Primary Care in Spain. Happy Audit Study. *Atencion Primaria* **2014**, 46 (9), 492-500.

Loiko, P.; Serres, J. M.; Mateos, X.; Yumashev, K.; Kuleshov, N.; Petrov, V.; Griebner, U.; Aguilo, M.; Diaz, F., Microchip laser operation of Tm,Ho:KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> crystal. *Optics Express* **2014**, 22 (23), 27976-27984.

Loiko, P. A.; Mateos, X.; Kuleshov, N. V.; Pavlyuk, A. A.; Yumashev, K. V.; Petrov, V.; Griebner, U.; Aguilo, M.; Diaz, F., Thermal-Lens-Driven Effects in N-g-Cut Yb-and Tm-Doped Monoclinic KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> Crystals. *Ieee Journal of Quantum Electronics* **2014**, 50 (8), 669-676.

Loiko, P. A.; Serres, J. M.; Mateos, X.; Yumashev, K. V.; Kuleshov, N. V.; Petrov, V.; Griebner, U.; Aguilo, M.; Diaz, F., Thermal lensing in Yb:KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> crystals cut along the optical indicatrix axes. *Laser Physics Letters* **2014**, 11 (12).

Loiko, P. A.; Serres, J. M.; Mateos, X.; Yumashev, K. V.; Kuleshov, N. V.; Petrov, V.; Griebner, U.; Aguilo, M.; Diaz, F., Characterization of the thermal lens in 3 at.% Tm: KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> and microchip laser operation. *Laser Physics Letters* **2014**, 11 (7).

Loiko, P. A.; Serres, J. M.; Mateos, X.; Yumashev, K. V.; Kuleshov, N. V.; Petrov, V.; Griebner, U.; Aguilo, M.; Diaz, F., Characterization of the thermal lens in 3 at.% Tm: KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> and microchip laser operation. *Laser Physics Letters* **2014**, 11 (7).

Malrieu, J. P.; Caballol, R.; Calzado, C. J.; de Graaf, C.; Guihery, N., Magnetic Interactions in Molecules and Highly Correlated Materials: Physical Content, Analytical Derivation, and Rigorous Extraction of Magnetic Hamiltonians. *Chemical Reviews* **2014**, 114 (1), 429-492.

Margalef, J.; Caldentey, X.; Karlsson, E. A.; Coll, M.; Mazuela, J.; Pamies, O.; Dieguez, M.; Pericas, M. A., A Theoretically-Guided Optimization of a New Family of

Modular P,S-Ligands for Iridium-Catalyzed Hydrogenation of Minimally Functionalized Olefins. *Chemistry-a European Journal* **2014**, *20* (38), 12201-12214.

Mateos, X.; Di Trapani, F.; Aguilo, M.; Diaz, F.; Griebner, U.; Petrov, V., Diode-pumped continuous-wave (Ho,Tm):KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> laser with > 1 W output power. *Optical Materials Express* **2014**, *4* (11), 2274-2279.

Mercier, Y.; Reguero, M., Looking for the species responsible of the anomalous fluorescence band in ortho-, meta- and para-(di-tert-butylamino)benzonitrile. *Computational and Theoretical Chemistry* **2014**, *1040*, 212-218.

Mognon, L.; Benet-Buchholz, J.; Wahidur Rahaman, S. M.; Bo, C.; Llobet, A., Ru-Zn Heteropolynuclear Complexes Containing a Dinucleating Bridging Ligand: Synthesis, Structure, and Isomerism. *Inorganic Chemistry* **2014**, *53* (23), 12407-12415.

Monakhov, K. Y.; Lopez, X.; Speldrich, M.; van Leusen, J.; Koegerler, P.; Braunstein, P.; Poblet, J. M., Magnetochemical Complexity of Hexa- and Heptanuclear Wheel Complexes of Late-3d Ions Supported by N, O- Donor PyridylMethanolate Ligands. *Chemistry-a European Journal* **2014**, *20* (13), 3769-3781.

Parent, L.; Aparicio, P. A.; de Oliveira, P.; Teillout, A.-L.; Poblet, J. M.; Lopez, X.; Mbomekalle, I. M., Effect of Electron (De)localization and Pairing in the Electrochemistry of Polyoxometalates: Study of Wells-Dawson Molybdotungstophosphate Derivatives. *Inorganic Chemistry* **2014**, *53* (12), 5941-5949.

Pascual-Borras, M.; Lopez, X.; Rodriguez-Fortea, A.; Errington, R. J.; Poblet, J. M., O-17 NMR chemical shifts in oxometalates: from the simplest monometallic species to mixed-metal polyoxometalates. *Chemical Science* **2014**, *5* (5), 2031-2042.

Qadri, M. U.; Diaz, A. F. D.; Cittadini, M.; Martucci, A.; Cinta Pujol, M.; Ferre-Borrull, J.; Llobet, E.; Aguilo, M.; Diaz, F., Effect of Pt Nanoparticles on the Optical Gas Sensing Properties of WO<sub>3</sub> Thin Films. *Sensors* **2014**, *14* (7), 11427-11443.

Ramirez, P. M.; Vlaisavjevich, B.; Gil, A.; Burns, P. C.; Nyman, M.; Bo, C.; Cramer, C. J.; Gagliardi, L., What do uranyl-peroxide nanocapsules have in their pockets? *Abstracts of Papers of the American Chemical Society* **2014**, 247.

Rodriguez, J. A.; Ramirez, P. J.; Giacomo Asara, G.; Vines, F.; Evans, J.; Liu, P.; Riccart, J. M.; Illas, F., Charge Polarization at a Au-TiC Interface and the Generation of Highly Active and Selective Catalysts for the Low-Temperature Water-Gas Shift Reaction. *Angewandte Chemie-International Edition* **2014**, *53* (42), 11270-11274.

Rodriguez-Fortea, A.; Poblet, J. M., Maximum aromaticity or maximum pentagon separation; which is the origin behind the stability of endohedral metallofullerenes? *Faraday Discussions* **2014**, *173*, 201-213.

Ruamps, R.; Maurice, R.; de Graaf, C.; Guihery, N., Interplay between Local Anisotropies in Binuclear Complexes. *Inorganic Chemistry* **2014**, *53* (9), 4508-4516.

Rubinstein, A.; Jimenez-Lozano, P.; Carbo, J. J.; Poblet, J. M.; Neumann, R., Aerobic Carbon-Carbon Bond Cleavage of Alkenes to Aldehydes Catalyzed by First-Row Transition-Metal-Substituted Polyoxometalates in the Presence of Nitrogen Dioxide. *Journal of the American Chemical Society* **2014**, *136* (31), 10941-10948.



- Rudavskiy, A.; Broer, R.; Etinski, M.; de Graaf, C.; Havenith, R. N. A.; Marian, C. M.; Sousa, C.; Tatchen, J., Analysis of the spin crossover mechanism in Fe(II) complexes. *Abstracts of Papers of the American Chemical Society* **2014**, 247.
- Rudavskiy, A.; Broer, R.; Etinski, M.; de Graaf, C.; Havenith, R. N. A.; Marian, C. M.; Sousa, C.; Tatchen, J., Analysis of the spin crossover mechanism in Fe(II) complexes. *Abstracts of Papers of the American Chemical Society* **2014**, 247.
- Saez, N.; Gavalda, J.; Ruiz, X.; Shevtsova, V., Detecting accelerometric nonlinearities in the international space station. *Acta Astronautica* **2014**, 103, 16-25.
- Saez, N.; Ruiz, X.; Gavalda, F.; Shevtsova, V., Comparative Analyses of ESA, NASA and JAXA Signals of Acceleration During the SODI-IVIDIL Experiment. *Microgravity Science and Technology* **2014**, 26 (1), 57-64.
- Saez, N.; Ruiz, X.; Gavalda, J.; Pallares, J.; Shevtsova, V., Comparative ISS accelerometric analyses. *Acta Astronautica* **2014**, 94 (2), 681-689.
- Sanchez-Garcia, L.; Ramirez, M. O.; Molina, P.; Gallego-Gomez, F.; Mateos, L.; Yraola, E.; Carvajal, J. J.; Aguilo, M.; Diaz, F.; de las Heras, C.; Bausa, L. E., Blue SHG Enhancement by Silver Nanocubes Photochemically Prepared on a RbTiO<sub>3</sub>PO<sub>4</sub> Ferroelectric Crystal. *Advanced Materials* **2014**, 26 (37), 6447-6453.
- Sanz, X.; Vogels, C. M.; Decken, A.; Bo, C.; Westcott, S. A.; Fernandez, E., Face to face activation of a phenylselenium borane with alpha,beta-unsaturated carbonyl substrates: facile synthesis of C-Se bonds. *Chemical Communications* **2014**, 50 (61), 8420-8423.
- Sartorel, A.; Miro, P.; Carraro, M.; Berardi, S.; Bortolini, O.; Bagno, A.; Bo, C.; Bonchio, M., Oxygenation by Ruthenium Monosubstituted Polyoxotungstates in Aqueous Solution: Experimental and Computational Dissection of a Ru(III)-Ru(V) Catalytic Cycle. *Chemistry-a European Journal* **2014**, 20 (35), 10932-10943.
- Saureu, S.; de Graaf, C., On the role of solvent effects on the electronic transitions in Fe(II) and Ru(II) complexes. *Chemical Physics* **2014**, 428, 59-66.
- Savchuk, O. A.; Carvajal, J. J.; Pujol, M. C.; Massons, J.; Haro-Gonzalez, P.; Jaque, D.; Aguilo, M.; Diaz, F., New strategies for luminescence thermometry in the biological range using upconverting nanoparticles. *Biophotonics: Photonic Solutions for Better Health Care Iv* **2014**, 9129.
- Savchuk, O. A.; Haro-Gonzalez, P.; Carvajal, J. J.; Jaque, D.; Massons, J.; Aguilo, M.; Diaz, F., Er:Yb:NaY<sub>2</sub>F<sub>5</sub>O up-converting nanoparticles for sub-tissue fluorescence lifetime thermal sensing. *Nanoscale* **2014**, 6 (16), 9727-9733.
- Serres, J. M.; Mateos, X.; Loiko, P.; Yumashev, K.; Kuleshov, N.; Petrov, V.; Griebner, U.; Aguil, M.; Diaz, F., Diode-pumped microchip Tm:KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> laser with more than 3 W of output power. *Optics Letters* **2014**, 39 (14), 4247-4250.
- Spivak, M.; Angeli, C.; Calzado, C. J.; de Graaf, C., Improving the Calculation of Magnetic Coupling Constants in MRPT Methods. *Journal of Computational Chemistry* **2014**, 35 (23), 1665-1671.

Tiferet, E.; Gil, A.; Bo, C.; Shvareva, T. Y.; Nyman, M.; Navrotsky, A., The Energy Landscape of Uranyl- Peroxide Species. *Chemistry-a European Journal* **2014**, *20* (13), 3646-3651.

Verendel, J. J.; Pamies, O.; Dieguez, M.; Andersson, P. G., Asymmetric Hydrogenation of Olefins Using Chiral Crabtree-type Catalysts: Scope and Limitations. *Chemical Reviews* **2014**, *114* (4), 2130-2169.

Vonci, M.; Bagherjeri, F. A.; Hall, P. D.; Gable, R. W.; Zavras, A.; O'Hair, R. A. J.; Liu, Y.; Zhang, J.; Field, M. R.; Taylor, M. B.; Du Plessis, J.; Bryant, G.; Riley, M.; Sorace, L.; Aparicio, P. A.; Lopez, X.; Poblet, J. M.; Ritchie, C.; Boskovic, C., Modular Molecules: Site-Selective Metal Substitution, Photoreduction, and Chirality in Polyoxometalate Hybrids. *Chemistry-a European Journal* **2014**, *20* (43), 14102-14111.

Whiteoak, C. J.; Kielland, N.; Laserna, V.; Castro-Gomez, F.; Martin, E.; Escudero-Adan, E. C.; Bo, C.; Kleij, A. W., Highly Active Aluminium Catalysts for the Formation of Organic Carbonates from CO<sub>2</sub> and Oxiranes. *Chemistry-a European Journal* **2014**, *20* (8), 2264-2275.

Yang, P.; Xiang, Y.; Lin, Z.; Bassil, B. S.; Cao, J.; Fan, L.; Fan, Y.; Li, M.-X.; Jimenez-Lozano, P.; Carbo, J. J.; Poblet, J. M.; Kortz, U., Alkaline Earth Guests in Polyoxopalladate Chemistry: From Nanocube to Nanostar via an Open-Shell Structure. *Angewandte Chemie-International Edition* **2014**, *53* (44), 11974-11978.

Zapata-Rivera, J.; Caballol, R.; Calzado, C. J.; Liakos, D. G.; Neese, F., On the Reaction Mechanism of the Complete Intermolecular O-2 Transfer between Mononuclear Nickel and Manganese Complexes with Macrocyclic Ligands. *Chemistry-a European Journal* **2014**, *20* (41), 13296-13304.

Zhang, Y.; Petrov, V.; Griebner, U.; Zhang, X.; Choi, S. Y.; Gwak, J. Y.; Rotermund, F.; Mateos, X.; Yu, H.; Zhang, H.; Liu, J., 90-fs diode-pumped Yb:CLNGG laser mode-locked using single-walled carbon nanotube saturable absorber. *Optics Express* **2014**, *22* (5), 5635-5640.

## Congressos

Els membres del DQFI han participat en múltiples congressos i reunions, tant de caràcter nacional com internacional. Se'n detalla la participació en conferències invitades.

### 4.6.2.1 Organització de congressos

Anna Clotet (membre del comitè organitzador)

31st European Conference on Surface Science (ECOSS-31 Barcelona, del 31 d'agost fins al 4 de setembre de 2015.

Elena Fernández (membre del comitè organitzador)

GEQOXXXII, Expert Group on Organometallic Chemistry

Tarragona, del 17 a l 19 de setembre de 2014.

Montserrat Diéguez (membre del comitè organitzador)

III COST-CARISMA 2015 Meeting

Tarragona, del 18 al 20 de març de 2015.

Oscar Pàmies (membre del comitè organitzador)

III COST-CARISMA 2015 Meeting

Tarragona, del 18 al 20 de març de 2015.

#### 4.6.2.2 Conferències invitades

**Ponent:** Airán Ródenas Seguí

**Títol:** "3D laser sub-micron structuring of optical materials for novel near- and mid-infrared photonics"

**Congrés:** AOPC-SPIE (Applied Optics and Photonics China) 2015

**Lloc:** Pequín

**Dates:** 6-8 de maig de 2015

**Ponent:** Airán Ródenas Seguí

**Títol:** "3D Laser Sub- $\mu\text{m}$  Structuring for Novel Near- and Mid-IR Photonics: Recent Advances in  $\text{SiO}_2$ ,  $\text{LiNbO}_3$  and YAG Processing"

**Congrés:** PIERS 2015

**Lloc:** Praga

**Dates:** 6-9 de juliol de 2015

**Ponent:** J.J. Carvajal

**Títol:** "Fully porous GaN p-n junctions fabricated by chemical vapor deposition: a green technology towards more efficient LEDs"

**Congrés:** 227th ECS Meeting

**Lloc:** Chicago (Illinois, EUA)

**Dates:** 24-26 de maig de 2015

**Ponent:** Carbó, J. J. **Títol:** "Computational Tools for Understanding and Predicting the Performance of Organometallic Catalysis: QSAR and Dynamic Approaches"

**Congrés:** XXXII Congreso GEQO

**Lloc:** Tarragona

**Dates:** 17-19 de setembre

**Ponent:** Josep M. Poble

**Títol:** "Computational Modelling of Polyoxometalates: From Redox Properties to Photocatalysis"

**Denominació de l'acte:** Invited talk at Tsinghua University

**Data:** 4 de maig de 2015

**País:** CHN (Xina)

**Localitat:** Pequín

**Ponent:** Josep M. Poble

**Títol:** "Endohedral Metallofullerenes: A Unique Host-Guest Association"

**Denominació de l'acte:** Invited talk at Institute of Chemistry

**Data:** 8 de maig de 2015

**País:** CHN (Xina)

**Localitat:** Pequín

**Ponent:** Josep M. Poble

**Títol:** "Endohedral Metallofullerenes: A Unique Host-Guest Association"

**Denominació de l'acte:** Invited talk at Xi'an Jiaotong University

**Data:** 11 de maig de 2015

**País:** CHN - Xina

**Localitat:** Xi'an

**Ponent:** Josep M. Poble

**Títol:** "Computational Modelling of Polyoxometalates: From Redox Properties to Photocatalysis"

**Denominació de l'acte:** Invited talk at Northeast Normal University University

**Data:** 13 de maig de 2015

**País:** CHN (Xina)

**Localitat:** Changchun

**Ponents:** J. M. Poblet; N. Alegret; K. Azmani; L. Abella; A. Rodríguez-Fortea

**Títol:** "Non IPR chlorofullerenes"

**Tipus de participació:** Ponència

**Ciutat de realització:** Chicago (EUA)

**Data:** maig de 2015

**Nom del congrés:** 227 ECS meeting

**Ponent:** Carmen Claver

**Títol:** "Catalytic CO<sub>2</sub> Hydrogenation"

**Congrés:** Jornada sobre Usos y Conversión de CO<sub>2</sub>: "Retos y oportunidades en España aportando valor al CO<sub>2</sub>"

**Lloc:** Madrid

**Dates:** 17-18 de febrer de 2015

**Ponent:** Carmen Claver

**Títol:** "Walking in Catalysis and Life"

**Congrés:** Mini-Symposium Honouring Professor Piet van Leeuwen on the Occasion of his Retirement from ICIQ

**Lloc:** Tarragona

**Dates:** 20 de febrer de 2015

**Ponent:** Carmen Claver

**Títol:** "Immobilized Pd catalysts for C-C bond formation"

**Congrés:** 3<sup>rd</sup> CARISMA Meeting –Catalytic Routines for Small Molecule Activation

**Lloc:** Tarragona

**Dates:** 19 de març de 2015

**Ponent:** Carmen Claver

**Títol:** "Catalysis for Sustainable Chemistry Homogeneous immobilized catalysts and nanocatalysts"

**Congrés:** Ciamician-González Lectureship 2014

**Ponent:** Carmen Claver

**Títol:** "Metal nanoparticles as catalysts for selective hydrogenation and Fischer-Tropsch reaction"

**Congrés:** Ciamician-González Lectureship 2014

**Ponent:** Carmen Claver

**Títol:** "Challenges in Catalysis: Homogeneous Catalysis for Continuous Flow and Nanocatalysts for Selective Processes"

**Congrés:** Ciamician-González Lectureship 2014

**Ponent:** Carmen Claver

**Títol:** "Immobilized Pd catalysts for C-C bond formation"

**Congrés:** XXXIII Reunión del Grupo Especializado de Química Organometálica

**Lloc:** Tarragona

**Dates:** 18 de setembre de 2014

**Ponent:** Carmen Claver

**Títol:** "Immobilized Pd N-heterocyclic Carbene Catalysts for C-C bond Formation"

**Congrés:** Mini-Symposium Wolfson Seminar Room, CRL; University of Oxford

**Lloc:** Oxford

**Dates:** 15 de maig de 2015

**Ponent:** Elena Fernandez

**Títol:** "Activación catalítica de boranos para síntesis competentes"

**Congrés:** XXXIII Reunión del Grupo Especializado de Química Organometálica

**Lloc:** Tarragona

**Dates:** 18 de setembre de 2014

**Ponent:** Carmen Claver

**Títol:** "Immobilisation of Pd-NHC complexes on inorganic supports activity and reusability in C-C coupling reactions"

**Congrés:** 7<sup>th</sup> Green Solvents Conference

**Lloc:** Dresden (Alemanya)

**Dates:** Octubre de 2014

**Ponent:** Carmen Claver

**Títol:** "Catalizadores para Química Sustentable. Catalizadores Homogéneos Inmovilizados y Nanocatalizadores"

**Congrés:** VIII Jornadas Chilenas de Catálisis y Adsorción (VIII JCATAD)

**Lloc:** Quilpué (Xile)

**Dates:** 19-21 de novembre de 2014

**Ponent:** Montserrat Diéguez

**Títol:** "Catalyst design for asymmetric hydrogenation of minimally functionalized olefins. A combined experimental and theoretical study"

**Congrés:** XXXV Bienal RSEQ

**Lloc:** La Corunya

**Dates:** 19-23 de juliol de 2015

**Ponent:** Montserrat Diéguez

**Títol:** "A theoretically-guided optimization of new ligand libraries for asymmetric hydrogenation of unfunctionalized olefins"

**Congrés:** ACS 250th National Meeting

**Lloc:** Boston (EUA)

**Dates:** 16-20 d'agost de 2015

**Ponent:** Oscar Pàmies

**Títol:** "In the quest for new highly active and versatile catalysts for Pd-catalyzed allylic substitution reactions"

**Congrés:** ACS 250th National Meeting

**Lloc:** Boston (EUA)

**Dates:** 16-20 d'agost de 2015

## Tesis doctorals

S'han defensat 19 tesis doctorals llegides durant el període del juny de 2014 al maig de 2015, 3 de les quals amb títol de doctor europeu i 4 amb títol de doctor internacional. 7 tesis han estat realitzades a l'ICIQ.

Doctorand: Núria Alegret Ramon

Títol tesi: "Computations on fullerenes: finding rules, identifying products and disclosing reactions paths"

Data defensa: 27/06/2014

Doctorat europeu: No

Doctorat internacional: Sí

Directors: Josep Maria Poblet Rius, Antonio Rodríguez Fortea

Doctorand: Jordi Ampurdanés Vilanova

Títol tesi: "Novel catalytic materials and strategies for hydrogen production and hydrogenation reactions based on pem electrolysis"

Data defensa: 17/12/2014

Doctorat europeu: No

Doctorat internacional: No

Director: Atsushi Urakawa

Doctorand: Pablo Arturo Aparicio Sánchez

Títol tesi: "Electronic effects governing the redox properties of polyoxometalates"

Data defensa: 26/09/2014

Doctorat europeu: No

Doctorat internacional: Sí

Directors: Josep Maria Poblet Rius, Javier López Fernández

Doctorand: Gian Giacomo Asara

Títol tesi: "Transition metal carbides as active phase and as support in catalysis: insights from first principles theoretical modelling"

Data defensa: 10/10/2014

Doctorat europeu: No

Doctorat internacional: Sí

Directors: Francesc Illas Riera, Josep Manel Ricart Pla



Doctorand: Antonio Bazzo

Títol tesi: "Continuous photocatalytic fuel production over wide-bandgap metal oxides"

Data defensa: 23/07/2014

Doctorat europeu: No

Doctorat internacional: No

Director: Atsushi Urakawa

Doctorand: Oleksandr Bilousov

Títol tesi: "Nanoporous gan by chemical vapor deposition: crystal growth, characterization and applications"

Data defensa: 09/07/2014

Doctorat europeu: Sí

Doctorat internacional: No

Directors: Magdalena Aguió Díaz, Joan Josep Carcajal Martí

Doctorand: Muhhamad Ali Butt

Títol tesi: "New photonic devices based on nlo(non-linear optical) crystalline waveguides"

Data defensa: 20/03/2015

Doctorat europeu: No

Doctorat internacional: No

Directores: Rosa Maria Solé Cartaña, Maria Cinta Pujol Baiges

Doctorand: Giuliano Carchini

Títol tesi: "A first principles investigation of the adsorption and reactions of polyfunctionalized molecules on oxides and metals"

Data defensa: 08/01/2015

Doctorat europeu: No

Doctorat internacional: No

Directora: Núria López Alonso

Doctorand: Fernando Simón Castro Gómez

Títol tesi: "Theoretical studies on transition metal catalyzed carbon dioxide fixation"

Data defensa: 09/10/2014

Doctorat europeu: Sí

Doctorat internacional: No

Director: Carles Bo Jané

Doctorand: Jorge Alonso Delgado Delgado

Títol tesi: "Cobalt nanoparticles for fischer-tropsch synthesis: from colloidal to well-defined supported nanocatalysts"

Data defensa: 19/12/2014

Doctorat europeu: No

Doctorat internacional: Sí

Directors: Carmen Claver Cabrero, Cyril Godard

Doctorand: Juan Gallardo Donaire

Títol tesi: "Synthesis of phthalides and benzolactones via catalytic c-h functionalization/c-o bond forming reactions"

Data defensa: 12/06/2014

Doctorat europeu: No

Doctorat internacional: No

Director: Ruben Martin Romo

Doctorand: Charles Goehry

Títol tesi: "Computational studies on host-guest catalysis"

Data defensa: 09/07/2014

Doctorat europeu: Sí

Doctorat internacional: No

Directors: Maria Besora Bonet, Feliu Maseras Cuní

Doctorand: Siham Iksi

Títol tesi: "Obtention des polycarbonates et carbonates à partir des alcènes"

Data defensa: 22/09/2014

Doctorat europeu: No

Doctorat internacional: No

Directors: Farid El Guemmout, Ali Aghmiz, Anna Maria Masdeu Bultó

Doctorand: Pablo Jiménez Lozano

Títol tesi: "Computational insights into the structure and reactivity of early and late tm-substituted polyoxometalates"

Data defensa: 18/06/2014

Doctorat europeu: No

Doctorat internacional: Sí

Directors: Josep Maria Poblet Rius, Jorge Juan Carbó Martín

Doctorand: Jessica Llop Castelbou

Títol tesi: "Rhodium nanoparticles stabilised by phosphorus based ligands. synthesis, characterisation and application in selective hydrogenations"

Data defensa: 04/07/2014

Doctorat europeu: Sí

Doctorat internacional: No

Directors: Carmen Claver Cabrero, Cyril Godard

Doctorand: Marc Mulet Gas

Títol tesi: "Computations on endohedral metallofullerenes: characterization, properties and growth"

Data defensa: 23/01/2015

Doctorat europeu: No

Doctorat internacional: Sí

Directors: Antonio Rodríguez Fortea, Josep Maria Poblet Rius

Doctorand: Takashi Ono

Títol tesi: "Second-row transition-metal complexes relevant to CO<sub>2</sub> reduction and water oxidation"

Data defensa: 03/06/2014

Doctorat europeu: No

Doctorat internacional: Sí

Director: Antoni Llobet Dalmases

Doctorand: Elena Pérez Barrado

Títol tesi: "Layered double hydroxides for applications in catalysis and electroluminescent devices"

Data defensa: 09/01/2015

Doctorat europeu: No

Doctorat internacional: Sí

Directors: Maria Cinta Pujol Baiges, Pilar Salagre Carnero, Lluís Marsal Garvi

Doctorand: Asraa Ziadi

Títol tesi: "Metal-catalyzed functionalization of C-C bonds in four-membered rings"

Data defensa: 10/11/2014

Doctorat europeu: No

Doctorat internacional: No

Director: Ruben Martin Romo

## Activitats d'extensió

### Conferències donades per científics visitants al Departament

#### *Juliol 2014*

08/07/14. Conferència Prof. Colm O'Dwyer (Joan J. Carvajal)

17/07/14. Conferència Prof. Craig Hill (Josep M. Poblet)

22/07/14. Conferència "From Waste to Value with CO<sub>2</sub> - An Organometallic Approach", Prof. Walter Leitner (Dept. QFI)

#### *Setembre 2014*

25/09/14. Seminari Prof. Hirofumi Yoshikawa (Josep M. Poblet)

#### *Octubre 2014*

14/10/15. Presentació oral del Prof. Anders Riisager (Dep. QFI)

#### *Novembre 2014*

06/11/14. Conferència Prof. Boris Tsukerblat (Ben-Gurion University of the Negev, Beer-Sheva, Israel): «A Paradigm of Quantum-Dot Cellular Automata: Molecular Implementation» (Antoni Rodríguez)

#### *Desembre 2014*

05/12/14. Conferència del Prof. Santos, University of Virginia: (EUA) «Transition metal-catalyzed borylation and silylation reactions» (Elena Fernández)

#### *Febrer 2015*

13/02/15. Conferència Prof. Angela d'Amora, Università di Nàpols: "Novel Au(I)-based molecular catalysts: from know-how to know-why" (Anna Masdeu)

#### *Març 2015*

23/03/15. Conferència Dr. Paul Kamer (Elena Fernández)

## Activitats d'extensió

### *Divulgació*

#### *Seminaris a centres de secundària*

- "Com fer un treball de recerca?" – Núria Ruiz, 17
- "L'art de respirar" – Núria Ruiz, 5
- "L'efecte hivernacle" – Jaume Massons, 3
- "2014: Any internacional de la cristal·lografia" – Joan J. Carvajal, 2
- "Un món de làsers" – Jona J. Carvajal, 4
- "Superordinadors: un microscopi per a la Química" – Carles Bo, 2
- "La llum: l'origen dels colors... i molt més" – Mar Reguero, 1

## *Altres activitats*

### IV 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 2014-15.

S'han fet seminaris per als professors dels instituts participants (desembre de 2014), visites als centres (març-abril de 2015) i una jornada final a Barcelona (CosmoCaixa) de presentació de resultats (maig 2015).

*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:* Inst. Camp Clar (Tarragona), Inst. Salvador Vilaseca (Reus), Inst. Baix Camp (Reus), Inst. d'Altafulla, Inst. Mediterrània (Vendrell), Inst. Joan Puig i Ferrater (la Selva del Camp), Col·legi Cor de Maria (Valls), Inst. Terra Alta (Gandesa), Inst. Vila-seca, Escola Puigcerver (Reus), Inst. Coster La Torre (la Bisbal del Penedès), Inst. Joan Amigó (l'Espluga de Francolí).

Primers premis: Institut de Castellar del Vallès (Castellar del Vallès), alumnes: Irina Gallardo, Estel Ramoneda, Jan Gili; Institut de Vila-seca (Vila-seca), alumnes: Víctor Espadas, Catalina Jereghi, J. Antonio Plaza; i Escola Puigcerver (Reus), alumnes: Marc Amigó, Marc Costa, Aleix Nogués, Mercè Montané. Premi al millor vídeo: Institut Joan Mercader (Igualada), alumnes: Isa Giraldo, Toni Doncel, Marina Vidal.

**Premi per votació popular:** Institut de Celrà (Celrà), alumnes: Judith Marcé, Paula Manrique, Aina Pagès, Paula Pérez.

### FEM RECERCA

Participació en el programa organitzat per la Universitat Rovira i Virgili adreçada a despertar vocacions, a incentivar l'interès per la recerca i la seva aplicació.

Durant el curs 2014-2015 s'han ofert 7 tallers: Depuració d'Aigües Residuals, **Ús de Microones en la Síntesi de Materials**, Polímers a partir de Primeres Matèries Renovables, Descobrint la Química amb l'Ordinador, Els Materials Superconductors i la Sostenibilitat, Visualització de Macromolècules i Fem Recerca amb Nous Materials.

### PARTICIPACIÓ EN L'OLIMPIADA DE FÍSICA DE CATALUNYA

Jaume Massons

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

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

#### *Organització de les VII Jornades de Química Verda*

Dirigida als estudiants de tots els cursos de la Llicenciatura en Química i en Bioquímica i als estudiants del grau en Química, Bioquímica i Biologia Molecular. En el desenvolupament d'aquestes jornades s'han realitzat tot un conjunt d'activitats: conferències, visita a empreses, taula rodona i documental, encaminades a fomen-

tar una pràctica de la química basada en els 12 principis de la química verda. (15-17 d'abril de 2015)

## 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	33.406,12	31.087,16	2.318,96
48	1.728,80	0,00	1.728,80
62	15.242,74	10.081,96	5.160,78
<b>TOTAL</b>	<b>58.318,87</b>	<b>41.169,12</b>	<b>10.149,75</b>

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 assistència a jornades i congressos, etc.

4800086 APORTACIÓ PLA ESTRATÈGIC			
TOTAL VINCULACIÓ	INGRESSOS	DESPESES	ROMANENT
2	3.076,36	2.438,08	638,28
62	4.353,77	4.353,77	0,00
<b>TOTAL</b>	<b>7.430,13</b>	<b>6.791,85</b>	<b>638,28</b>

El pressupost del Pla Estratègic ha cobert despeses de laboratori i ha cofinançat part de la compra d'equipament docent.

4800354 OVH DEPARTAMENT QFII			
TOTAL VINCULACIÓ	INGRESSOS	DESPESES	ROMANENT
2	46.642,35	20.332,32	26.310,03
48	9.431,63	1.104,38	8.327,25
62	5.229,95	2.992,19	2.237,76
<b>TOTAL</b>	<b>61.303,93</b>	<b>24.428,89</b>	<b>36.875,04</b>

Els diners de les despeses generals generades 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 jornades i congressos, etc.

4800368 PACTE DE DEDICACIÓ			
TOTAL VINCULACIÓ	INGRESSOS	DESPESES	ROMANENT
2	10.869,65	8.053,08	2.816,57
48	424,51	132,00	292,51
62	4.729,05	4.419,55	309,50
<b>TOTAL</b>	<b>16.023,21</b>	<b>12.604,63</b>	<b>3.418,58</b>

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