

Departament de Química Física i Inorgànica

Campus Sescelades

Marcel·lí Domingo, s/n – 43007 Tarragona

Tel. 977 558 137 – Fax 977 559 563

secqfi@urv.cat

Dr. Josep M. Poblet Rius, director

Dr. Oscar Pàmies Ollé, 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 permeten l'acompliment del Contracte programa signat a començament del curs 2011-12 vigent encara. A la taula 1 es resumeix el nombre de tesis doctorals defensades durant el curs 2015-16; s'hi inclouen el nombre de tesis amb menció europea/internacional i el nombre de tesis escrites en anglès. També s'hi inclou la mitjana dels cursos 2009-10, 2010-11, 2011-12, 2012-13, 2013-14 i 2014-15.

Taula 1. *Nombre de tesis doctorals defensades al Departament en el període 2015-16 incloent la mitjana dels cursos 2009-2015*

CURS	TESIS DEFENSADAS	MENCIÓ EUROPEA/ INTERNACIONAL	ESCRITES EN ANGLÈS
2015-16	12	11 (91,67%)	11 (91,67%)
Mitjana 2009-2015	13	8.3 (64,1%)	12 (92,31%)

D'acord amb les dades presentades, el 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 (91,67% el curs 2015-16). El percentatge de tesis amb menció europea o internacional en l'últim curs (91,67%) també **supera** el 67,65% que ens havíem fixat.

Un altre punt que estem complint d'acord amb el que vam 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 2 presenta el nombre d'aquestes publicacions realitzades per membres del Departament en el període 2010-2015. La mitjana en el nombre de publicacions en aquest període és de 81, que queda per sobre del llindar establert de 70 publicacions que havíem fixat en el Contracte programa.

Taula 2. *Nombre de publicacions internacionals indexades (ISI)*

2010	76
2011	75
2012	80
2013	86
2014	84
2015	85

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 5 projectes europeus i 2 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 en relació amb els trams de recerca vius possibles (94 trams), cal dir que hem assolit el llindar de 89 trams de recerca que havíem establert en el Contracte programa.

La taula 3 presenta els ingressos obtinguts per via competitiva durant els anys 2010-2015, indicant 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 3. *Ingressos obtinguts per via competitiva procedents de diferents projectes de recerca en el període 2010-2015*

Origen del finançament	2010	2011	2012	2013	2014	2015
Altres	8.261,11	6.655,50	12.553,50	0	28.322,79	460.035,29
Pla Nacional	1.274.721,95	1.177.687,06	209.027,48	0	692.885,51	1.001.333,00
Pla de Recerca de Catalunya	773.380,20	151.754,37	565.245,67	0	592.563,85	399.120,00
Europa	311.985,00	88.480,00	2,00	1.077.505,00	230.037,60	400.000,00
URV	465.661,62	243.725,21	163.753,61	0	265.494,54	493.773,63
Total	2.834.009,88	1.659.302,14	950.582,26	1.077.505,00	1.809.304,29	2.754.261,92

La taula 4 mostra els ingressos obtinguts per via no competitiva, segons les dades que figuren al Pacte de dedicació dels membres del Departament per al període 2010-2015 a l'apartat de «Transferència de tecnologia i coneixement». Les dades del 2015 provenen de la URV en xifres.

Taula 4. *Ingressos obtinguts per via no competitiva procedents de projectes de recerca*

Any	Via no competitiva (€)
2010	262.577,13
2011	1.436.951,03
2012	237.100,49
2013	558.981,00
2014	891.850,37
2015	414.944,80

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 a recerca per part de les diferents administracions públiques, aquests darrers dos anys s'observa un increment en els ingressos procedents de projectes del Pla Nacional, del Pla de Recerca de Catalunya i de convocatòries europees. 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 4 que se superen els 200.000 € previstos en el Contracte programa.

Tot això es reflecteix en un compliment 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

Quant 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, se'n manté una productivitat elevada, així com es manté, també, el nombre de projectes de recerca en què participen grups del Departament.

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 96,55% dels membres del Departament compleixen el Pacte de dedicació. La mitjana d'UAA totals és de 19,43 en el curs 2014-15, 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 de 10,9 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 pel que fa a recerca que es tradueixen en nombroses publicacions conjuntes. Els grups de recerca potencien la mobilitat entre els seus investigadors en formació, tal com es veu en l'elevat percentatge de tesis amb menció europea.

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

Des del 2015 es treballa activament amb la Facultat de Química per tal de captar estudiants estrangers, fonamentalment de la Xina, i obrir una línia d'aprenentatge en anglès en el Grau en Química.

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, en 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, Datàlisi i Disseny Molecular
- Arqueologia del Quaternari i Evolució Humana
- Dret Ambiental
- Nanociència, Materials i Processos: Tecnologia Química de Frontera
- Eines per al Desenvolupament Professional a la Indústria

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:** 134 estudiants matriculats

Beques

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

Judit Ollé

Carit Brosgaard

Marc Alies

Innovació docent i noves tecnologies

Els membres del Departament han focalitzat els 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 de 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: 8 (1 interí)
- Personal investigador ordinari: 1
- Personal investigador postdoctoral: 1
- Personal investigador ICREA: 2
- Professors associats no doctors: 2
- Becaris predoctorals:
 - FPI Ministeri: 6
 - FPI Generalitat: 4
 - URV: 7
 - BRDI: 6
- Doctorands: 36
- Tècnic gestió EMaS : 1
- Tècnics informàtics: 2
- Tècnics de laboratori: 4
- Administratius: 2
- Becaris assistents docents: 3

Grups i línies de recerca

Grup d'Organometàl·lics i Catàlisis Homogènies

- 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.
- Disseny i aplicació de metaloenzims artificials.

Grup de Química Quàntica

- Estructura i reactivitat de metal·lofullerenes.
- 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 a aplicacions catalítiques.
- Transformació catalítica de glicerina en productes d'alt valor afegit.
- Obtenció de CLA de la isomerització catalítica de l'àcid linoleic.
- Eliminació de matèria orgànica mitjançant oxidació catalítica.
- 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 a òptica integrada.

Grup de Microgravetat

- Creixement de 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 xarxes següents:

- Xarxa de referència d'R+D+I en Química Teòrica i Computacional. Contracte programa entre el Departament d'Innovació, Universitats i Empresa i la Fundació Bosch i Gimpera, hi participen 17 grups consolidats de Catalunya.
- Xarxa temàtica Atomic Transport in Liquid Alloys and Semiconductors (ATLAS) de 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 2015/16 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, Consolidar)
- ◆ 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 i d'àmbit estatal
- ★ 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

■ Títol	Processat digital de senyals en entorns aeroespacials i biomèdics (SPABE)
Investigador principal/Grup	José Javier Ruiz Martí
Organisme	AGAUR
Programa	Grups consolidats
Codi oficial	2014SGR365
Data d'inici	2014
Data de finalització	2016
◆ Títol	Organometàl·lics i catàlisi homogènia
Investigador principal/Grup	Maria del Carmen Orosia Claver Cabrero/OMICH
Organisme	URV - Universitat Rovira i Virgili
Programa	Pla de Foment de la recerca (URV)
Codi oficial	2014PFR-URV-B2-21
Data d'inici	2014
Data de finalització	2016
◆ Títol	Zeptònic-plasmònica i ultradetecció
Investigador principal/Grup	Ramon Angel Alvarez Puebla
Organisme	URV - Universitat Rovira i Virgili
Programa	Pla de Foment de la Recerca (URV)
Codi oficial	2014PFR-URV-B2-01
Data d'inici	2014
Data de finalització	2016
◆ Títol	Química quàntica
Investigador Principal/Grup	Josep Maria Poblet Rius/QQ
Organisme	URV - Universitat Rovira i Virgili
Programa	Pla de Foment de la Recerca (URV)

Codi oficial	2014PFR-URV-B2-65
Data d'inici	2014
Data de finalització	2016
◆ Títol	Física i cristal·lografia de materials (FICMA)
Investigador principal/Grup	Francisco Manuel Díaz González
Organisme	URV - Universitat Rovira i Virgili
Programa	Pla de Foment de la Recerca (URV)
Codi oficial	2014PFR-URV-B2-28
Data d'inici	2014
Data de finalització	2016

◆ Títol	Materials catalítics en química verda (GreenCat)
Investigador principal/Grup	Maria Pilar Salagre Carnero
Organisme	URV - Universitat Rovira i Virgili
Programa	Pla de Foment de la Recerca (URV)
Codi oficial	2014PFR-URV-B2-76
Data d'inici	2014
Data de finalització	2016
◆ Títol	Processat digital de senyals en entorns aeroespacials i biomèdics (SPABE)
Investigador principal/Grup	José Javier Ruiz Marti
Organisme	URV - Universitat Rovira i Virgili
Programa	Pla de Foment de la Recerca (URV)
Codi oficial	2014PFR-URV-B2-75
Data d'inici	2014
Data de finalització	2016
● Títol	Fotografiar moléculas organoboradas en estado líquido y estudiar su comportamiento dinámico mediante una película real
Investigador principal/Grup	Maria Elena Fernández Gutierrez
Codi oficial	CTQ2013-50219-EXP
Convocatòria	Projectes Explora Ciència/Tecnologia
Programa	
Data d'inici	01/09/2014
Data de finalització	31/08/2015
● Títol	Retos en la utilización de materias primas renovables: su eficiente transformación química mediante catálisis homogénea y nanocatálisis
Investigador principal/Grup	Carmen Claver
Codi oficial	CTQ2013-43438-R
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals.
Programa	
Data d'inici	01/01/2014
Data de finalització	31/12/2016
● Títol	Aproximaciones innovadoras para el descubrimiento sostenible y rentable de catalizadores quirales para química fina

Investigador principal/Grup	Montserrat Diéguez
Codi oficial	CTQ2013-40568-P
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	
Data d'inici	01/01/2014
Data de finalització	31/12/2016

● Títol	Construyendo funcionalidad mediante la química organoborada catalítica
Investigador principal/Grup	Elena Fernández
Codi oficial	CTQ2013-43395-P
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals.
Programa	
Data d'inici	01/01/2014
Data de finalització	31/12/2016
● Títol	Nanomateriales moleculares para ayudar a la medicina molecular
Investigador principal/Grup	Maria Pilar Rivera Gil
Codi oficial	CTQ2013-45433-P
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	
Data d'inici	01/01/2014
Data de finalització	31/12/2016
● Títol	Nanocápsulas de óxidos metálicos y complejos de metales de transición: Abordando los retos de la sociedad desde la nanociencia molecular y la catálisis
Investigador principal/Grup	Carles Bo Jané
Codi Oficial	CTQ2014-52824-R
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	
Data d'inici	01/01/2015
Data de finalització	31/12/2017
● Títol	Dinámica de estados excitados: Estudio teórico de reactividad y <i>spin crossover</i> inducidos por irradiación
Investigador principal/Grup	Cornelis de Graaf
Codi oficial	CTQ2014-51938-P
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	
Data d'inici	01/01/2015
Data de finalització	31/12/2017
● Títol	Modelización computacional de compuestos de interés en nanociencia, energía limpia y catálisis eficiente
Investigador principal/Grup	Josep Maria Poblet
Codi oficial	CTQ2014-52774-P
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	
Data d'inici	01/01/2015
Data de finalització	31/12/2017

● Títol	Dispositivos láser compactos y de pulsos ultracortos en el NIR para aplicaciones de biodetección
Investigador principal/Grup	Magdalena Aguiló Díaz
Codi oficial	TEC2014-55948-R
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals.
Programa	
Data d'inici	01/01/2015
Data de finalització	31/12/2017
● Títol	Análisis del impacto que las maniobras vehiculares impulsivas de la Estación Espacial Internacional tienen en los experimentos de termodifusión de la serie DCMIX
Investigador principal/Grup	José Javier Ruiz Martí
Codi oficial	ESP2014-53603-P
Convocatòria	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	
Data d'inici	01/01/2015
Data de finalització	31/12/2017
◆ Títol	Japanese-European De-Icing Aircraft Collaborative Exploration (JEDI ACE)
Investigador principal/Grup	Francesc Díaz González
Organisme	Unió Europea
Programa	FP7
Codi oficial	314335
Data d'inici	01/11/2012
Data de finalització	30/04/2016
◆ Títol	Eco-friendly biorefinery fine chemicals from CO ₂ photocatalytic reduction
Investigador principal/Grup	Maria del Carmen Claver
Organisme	Unió Europea
Programa	FP7 – NMP-2012-SMALL-6
Codi oficial	
Data d'inici	
Data de finalització	
◆ Títol	SERS ultrasensitive universal sensing of proteins through cross-reactive sensor prove
Investigador Principal/Grup	Ramon Angel Alvarez Puebla
Organisme	Unió Europea
Programa	FP7 – PEOPLE-2012-IEF
Codi oficial	329131
Data d'inici	
Data de finalització	
◆ Títol	Prion detection through organized arrays of gold nanorods as SERS substrates
Investigador principal/Grup	Ramon Angel Alvarez Puebla
Organisme	Unió Europea
Programa	FP7 – PEOPLE-2013-IEF

Codi oficial	623527
Data d'inici	01/04/2014
Data de finalització	31/03/2016
♦ Títol	New adaptable catalytic reactor methodologies for Process Intensification
Investigador principal/Grup	Maria del Carmen Claver Cabrero
Organisme	Unió Europea
Programa	H2020-SPIRE-2015. Sustainable Process Industries.
Codi oficial	677471
Data d'inici	2016
Data de finalització	2019
■ Títol	Catalytic routines for small molecule activation (CARISMA)
Investigador principal/Grup	Montserrat Dieguez Fernandez
Codi oficial	CM1205
Convocatòria	COST
Programa	
Data d'inici	2013
Data de finalització	2017
■ Títol	The European Upconversion Network: From the Design of Photon-upconverting Nanomaterials to (Biomedical) Applications
Investigador principal/Grup	Francesc Díaz González
Organisme	Unió Europea
Programa	COST domain: Chemistry and Molecular Sciences and Technologies (CMST)
Codi oficial	CM1403
Data d'inici	19/11/2014
Data de finalització	18/11/2018

■ Títol	Programa ICREA Acadèmia 2010
Investigador principal/Grup	Oscar Pàmies/OMICH
Organisme	Generalitat
Programa	Intensificació de la Recerca
Codi oficial	2010ICREA-01
Data d'inici	01/01/2011
Data de finalització	31/12/2015

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

Organisme	Generalitat
Programa	Intensificació de la Recerca
Codi oficial	2015ICREA-01
Data d'inici	01/01/2016
Data de finalització	31/12/2020
n Títol	Programa ICREA Acadèmia 2015
Investigador principal/Grup	Josep Maria Poblet
Organisme	Generalitat
Programa	Intensificació de la Recerca
Codi oficial	2015ICREA-02
Data d'inici	01/01/2016
Data de finalització	31/12/2020

■ Títol	Magnetic materials: Molecules, clusters and extended systems. A quantum chemical approach
Investigador principal/Grup	Rosa Caballol Lorenzo
Organisme	ICREA
Programa	ICREA-Investigador ICREA SÈNIOR/JÚNIOR. ICREA
Codi oficial	2005ICREA-001
Data d'inici	01/01/2015
Data de finalització	31/12/2015
■ Títol	Ajut pont tesi doctoral: Judith Cecilia Granados Reyes
Investigador principal/Grup	Yolanda Cesteros Fernández
Organisme	Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació. Generalitat de Catalunya
Programa	FI-Ajut pont FI. DIUE
Codi oficial	2015PONT/FI/08
Data d'inici	2015
Data de finalització	2015

■ Títol	Ajut pont tesi doctoral: Muhammad Ali Butt
Investigador principal/Grup	Magdalena Aguiló Díaz
Organisme	Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació. Generalitat de Catalunya
Programa	FI-Ajut pont FI. DIUE
Codi oficial	2015PONT/FI/04
Data d'inici	2015
Data de finalització	2015
■ Títol	Mid-infrared integrated optical sensors
Investigador principal/Grup	Airan Rodenas Segui
Organisme	Departament d'Economia i Coneixement. Generalitat de Catalunya
Programa	FIB-Ajuts per contractar a personal investigador novell. Modalitat B. DIUE
Codi oficial	2014FI_B 00274
Data d'inici	01/02/2014

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

■ Títol	Sustainable production of valuable chemicals under continuous flow conditions
Investigador Principal/Grup	Maria del Carmen Claver Cabrero
Organisme	Agència de Suport a l'Empresa Catalana (ACC1Ó)
Programa	Ajuts TECNIO, per a la mobilitat de personal investigador (TECNIOSPRING)
Codi oficial	TECSPR14-1-0045
Data d'inici	01/11/2014
Data de finalització	30/10/2016
■ Títol	Efficient synthesis of highly functionalized compounds of industrial-thierry león
Investigador Principal/Grup	Maria Elena Fernandez Gutierrez
Organisme	Agència de Suport a l'Empresa Catalana (ACC1Ó)
Programa	Ajuts TECNIO, per a la mobilitat de personal investigador (TECNIOSPRING)
Codi oficial	TECSPR13-1-0040
Data d'inici	01/05/2014
Data de finalització	30/04/2016

■ Títol	Bartosz Tylkowski - New generation of photo-triggered microcapsules
Investigador principal/Grup	Ramón Angel Alvarez Puebla
Organisme	Agència de Suport a l'Empresa Catalana (ACC1Ó)
Programa	Ajuts TECNIO, per a la mobilitat de personal investigador (TECNIOSPRING)
Codi oficial	TECSPR15-1-0044
Data d'inici	
Data de finalització	
■ Títol	Plasmonic nanoprobe to detect disease biomarkers
Investigador principal/Grup	Ramón Angel Alvarez Puebla
Organisme	Agència de Suport a l'Empresa Catalana (ACC1Ó)
Programa	Ajuts TECNIO, per a la mobilitat de personal investigador (TECNIOSPRING)
Codi oficial	TECSPR15-1-0045
Data d'inici	
Data de finalització	
■ Títol	Desarrollo sostenible de catalizadores metálicos quirales inteligentes para procesos de interés industrial
Investigador principal/Grup	Marc Magre
Organisme	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	FPI-Estades breus a Espanya i a l'estranger
Codi oficial	EEBB-I-2015-10087
Data d'inici	2015
Data de finalització	2015

■ Títol	Descripción ab initio de procesos fotoinducidos en complejos de metales de transición y compuestos orgánicos
Investigador principal/Grup	Mariano Alejo Spivak
Organisme	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	FPI-Estades breus a Espanya i a l'estranger
Codi oficial	EEBB-I-2015-10204
Data d'inici	2015
Data de finalització	2015
■ Títol	Descripción ab initio de procesos fotoinducidos en complejos de metales de transición y compuestos orgánicos
Investigador principal/Grup	Mariano Alejo Spivak
Organisme	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	FPI-Estades breus a Espanya i a l'estranger
Codi oficial	EEBB-I-2016-11267
Data d'inici	2015
Data de finalització	2015
■ Títol	Hacia la comprensión de las interacciones moleculares entre polioxometalatos y sistemas biológicos. Una aproximación computacional híbrida
Investigador principal/Grup	Jorge Juan Carbó Martin
Organisme	MECD

Programa	PR-SM-Ajuts per a estades d'investigadors, professors d'universitats i escoles universitàries espanyoles en centres d'investigació espanyols i estrangers inclòs el programa Salvador de Madariaga. MECD
Codi oficial	PRX14/00446
Data d'inici	2015
Data de finalització	2015
■ Títol	V Concurso de Cristalización en la Escuela
Investigador principal/Grup	Magdalena Aguiló Díaz
Organisme	FECYT
Programa	Programa de Cultura Científica i de la Innovació. Línia d'actuació 2. Creativitat i vocacions científiques. Modalitat 2.1. Foment de la creativitat i les vocacions científiques
Codi oficial	FCT-14-9874
Data d'inici	2015
Data de finalització	2015
■ Títol	FPI-Ajudes per a la formació de personal investigador
Investigador principal/Grup	Maria Elena Fernández
Organisme	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	FPI-Ajudes per a la formació de personal investigador
Codi oficial	BES-2014-067674
Data d'inici	2015
Data de finalització	2017

■ Títol	FPI-Ajudes per a la formació de personal investigador
Investigador principal/Grup	Maria del Carmen Claver Cabrero
Organisme	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	FPI-Ajudes per a la formació de personal investigador
Codi oficial	BES-2014-069199
Data d'inici	2015
Data de finalització	2017
■ Títol	Dinámica de estados excitados: estudio teórico de reactividad y spin crossover inducidos por irradiación
Investigador principal/Grup	Cornelis de Graaf
Organisme	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	FPI-Ajudes per a la formació de personal investigador
Codi oficial	BES-2015-074364
Data d'inici	2015
Data de finalització	2017
■ Títol	FPI-Ajudes per a la formació de personal investigador
Investigador Principal/Grup	José Javier Ruiz Martí
Organisme	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	FPI-Ajudes per a la formació de personal investigador
Codi oficial	BES-2015-074665
Data d'inici	2015
Data de finalització	2017

■ Títol	FPI-Ajudes per a la formació de personal investigador
Investigador principal/Grup	Josep Maria Poblet
Organisme	Pla Nacional d'I+D+I. Programes Nacionals
Programa	FPI-Ajudes per a la formació de personal investigador
Codi oficial	BES-2015-075637
Data d'inici	2015
Data de finalització	2017
* Títol	Dispositivo y método para medida remota de temperatura
Investigador principal/Grup	Jaime Masons Bosch
Organisme	URV
Programa	PAT-Gestió patents. UROV
Codi oficial	2015PAT-03
Data d'inici	2015
Data de finalització	2015

* Títol	Laboral grup I
Investigador principal/Grup	Carmen Claver Cabrero
Organisme	URV
Programa	PSR-Personal tècnic de suport a la recerca. Consolidació. UROV
Codi oficial	2008PSR/C01
Data d'inici	01/10/2015
Data de finalització	30/09/2016
* Títol	Laboral grup III
Investigador principal/Grup	Francisco Manuel Díaz González
Organisme	URV
Programa	PSR-Personal tècnic de suport a la recerca. Consolidació. UROV
Codi oficial	2006PSR/C04
Data d'inici	01/10/2015
Data de finalització	30/09/2016
* Títol	Laboral grup III
Investigador principal/Grup	Rosa Caballol lorenzo
Organisme	URV
Programa	PSR-Personal tècnic de suport a la recerca. Consolidació. UROV
Codi oficial	2005PSR/C14
Data d'inici	01/10/2015
Data de finalització	30/09/2016
* Títol	Laboral grup III
Investigador principal/Grup	Magdalena Aguiló Díaz
Organisme	URV
Programa	PSR-Personal tècnic de suport a la recerca. Consolidació. UROV
Codi oficial	2010PSR/C01
Data d'inici	01/10/2015

Data de finalització	30/09/2016
* Títol	Professor Distingit de la URV: Reducció docent
Investigador principal/Grup	Magdalena Aguiló Díaz
Organisme	URV
Programa	PDU-Programa de Professor Distingit de la URV. UROV
Codi oficial	2015PDU/21
Data d'inici	01/01/2015
Data de finalització	31/12/2016
* Títol	Professor distingit de la URV: Reducció docent
Investigador principal/Grup	Josep Maria Poblet Rius
Organisme	URV
Programa	PDU-Programa de Professor Distingit de la URV. UROV
Codi oficial	2015PDU/28
Data d'inici	01/01/2015
Data de finalització	31/12/2016
* Títol	Subvenció al Departament per a investigadors actius el 2015
Investigador principal/Grup	Departament de Química Física i Inorgànica
Organisme	URV
Programa	Investigador Actiu. UROV
Codi oficial	IA2015-23
Data d'inici	01/01/2015
Data de finalització	31/12/2015
* Títol	Química Inorgànica
Investigador principal/Grup	Maria del Carmen Claver Cabrero
Organisme	URV
Programa	CAJAL-Programa Ramón y Cajal
Codi oficial	RYC-2009-04248
Data d'inici	01/01/2015
Data de finalització	31/12/2015
* Títol	Retos en la utilización de materias primas renovables: su eficiente transformación química mediante catálisis homogénea y nanocatálisis
Investigador principal/Grup	Maria del Carmen Claver Cabrero
Organisme	URV
Programa	Beques Martí i Franquès. Programa de contractes URV-CTQC de personal investigador predoctoral en formació
Codi oficial	2015PMF-PIPF-69
Data d'inici	01/10/2015
Data de finalització	30/09/2018
* Títol	Programa de doctorat: Ciència Tecnologia Química
Investigador principal/Grup	Montserrat Diéguez Fernández
Organisme	URV
Programa	Beques Martí i Franquès. Programa de contractes URV-SRHIO de personal investigador predoctoral en formació
Codi oficial	2015PMF-PIPF-13
Data d'inici	01/10/2015

Data de finalització	30/09/2018
* Títol	Programa de doctorat: Ciència Tecnologia Química
Investigador principal/Grup	Jorge Juan Carbó Martin
Organisme	URV
Programa	Beques Martí i Franquès. Programa de contractes URV-SRHiO de personal investigador predoctoral en formació
Codi oficial	2015PMF-PIPF-14
Data d'inici	01/10/2015
Data de finalització	30/09/2018

* Títol	Programa de doctorat: Ciència Tecnologia Química
Investigador principal/Grup	Jorge Juan Carbó Martin
Organisme	URV
Programa	Beques Martí i Franquès. Programa de contractes URV-SRHiO de personal investigador predoctoral en formació
Codi oficial	2015PMF-PIPF-15
Data d'inici	01/10/2015
Data de finalització	30/09/2018

4.4.2 Contractes amb empreses

● Títol	Addenda: Síntesis de nanoclusters de AU y estudio de sus propiedades fotoquímicas para su aplicación en la remediación medioambiental
Investigador principal/Grup	Maria Elena Fernández Guterres
Codi oficial	TQC14026S
Data d'inici	01/05/2014
Data de finalització	31/12/2015
● Títol	Addenda. Telomerisation of isoprene
Investigador principal/Grup	Cyril Godard
Codi oficial	TQC14017S
Data d'inici	01/02/2014
Data de finalització	31/01/2015
● Títol	Desenvolupament de nous sensors òptics per a diagnòstics i biodetecció
Investigador principal/Grup	Ramon Angel Alvarez Puebla
Codi oficial	TQC14011S
Data d'inici	06/02/2014
Data de finalització	05/02/2015
● Títol	Diferentes grados depolipropilenocarbonato y desarrollo (síntesis y tests) de catalizadores (salvando patentes actuales) para su obtención
Investigador principal/Grup	Cyril Godard
Codi oficial	TQC14029S
Data d'inici	15/07/2014
Data de finalització	31/12/2015

● Títol	Programa conjunt de beques de personal investigador en formació. 1 beca a l'àmbit del patrimoni i la cultura
Investigador principal/Grup	Carmen Claver Cabrero
Codi oficial	FC006363
Data d'inici	01/10/2014
Data de finalització	30/09/2017
● Títol	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
Investigador principal/Grup	Ramon Angel Alvarez Puebla
Codi oficial	DOCTORAT INDUSTRIAL-14/04
Data d'inici	19/03/2015
Data de finalització	18/03/2018
● Títol	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
Investigador principal/Grup	Ramon Angel Alvarez Puebla
Codi oficial	DOCTORAT INDUSTRIAL-14/05 (2014 DI 051)
Data d'inici	19/03/2015
Data de finalització	18/03/2018
● Títol	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
Investigador principal/Grup	Ramon Angel Alvarez Puebla
Codi oficial	DOCTORAT INDUSTRIAL-14/06 (2014 DI 052)
Data d'inici	19/03/2015
Data de finalització	18/03/2018
● Títol	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
Investigador principal/Grup	Ramon Angel Alvarez Puebla
Codi oficial	DOCTORAT INDUSTRIAL-14/07
Data d'inici	19/03/2015
Data de finalització	18/03/2018

● Títol	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
Investigador principal/Grup	Francisco Manuel Díaz González
Codi oficial	DOCTORAT INDUSTRIAL-14/03 (2014 DI 054)
Data d'inici	19/03/2015
Data de finalització	18/03/2018
● Títol	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
Investigador principal/Grup	Ramon Angel Alvarez Puebla
Codi oficial	DOCTORAT INDUSTRIAL-14/06 (2014 DI 055)
Data d'inici	19/03/2015
Data de finalització	18/03/2018
● Títol	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)
Investigador principal/Grup	Ramon Angel Alvarez Puebla
Codi oficial	DOCTORAT INDUSTRIAL-2015 DI 015
Data d'inici	19/03/2016
Data de finalització	18/03/2019

Col·laboracions internacionals

- Institut Charles Gerhardt-CTMM- Université de Montpellier 2 -C.N.R.S., Montpellier (França)
- Universitat P. Sabatier, Tolosa (França)
- Institute Néel – CNRS, Grenoble (França)
- Laboratoire des Matériaux Inorganiques Université Blaise Pascal, Clermont Ferrand (França)
- Université Louis Pasteur, Estrasburg (França)
- Université Claude Bernard, Lió (França)
- Università degli Studi di Milano-Bicocca (Itàlia)
- Università degli Studi di Genova (Itàlia)
- Dipartimento Scientifico e Tecnologico, Univ. Verona (Itàlia)

- Università de Trieste (Itàlia)
- Centre Nano-SISTEMI, Alessandria (Itàlia)
- Imperial College, Londres (Regne Unit)
- Dyson Perry Lab., Oxford (Regne Unit)
- Materials and Engineering Research, Hallam University, Sheffield (Regne Unit)
- University of Durham (Regne Unit)
- University of Glasgow (Regne Unit)
- University of California, Davis (EUA)
- Florida State University (EUA)
- State University of New York at Stony Brook (USA)
- University of Clemson (USA)
- Max Born Institute, Berlín (Alemanya)
- University of Würzburg, Würzburg (Alemanya)
- University of Bielefeld (Alemanya)
- Jacobs University Bremen (Alemanya)
- RWTH Aachen University (Alemanya)
- Advanced Photonics Laboratory, Institute of Imaging and Applied Optics, École Polytechnique Fédérale, Lausana (Suïssa)
- Laser physics, KTH – Royal Institute of Technology de Stockholm (Suècia)
- Polish Academy of Sciences, Breslau (Polònia)
- Queen's University (Canadà)
- Mount Alison University (Canadà)
- Université de Sherbrooke (Canadà)
- UNAM (Mèxic)
- University College Dublin (Irlanda)
- University of Cork – Tyndall National Institute (Irlanda)
- University of Graz (Àustria)
- Academy of Science (Rússia)
- Abdelmalek Esaadi Tetuan (Marroc)
- Universidad de Concepción (Xile)
- Technische Universiteit Eindhoven (Holanda)

- University of Southampton (Regne Unit)
- Anjou Univeristy (Corea)
- Laboratoire de Materiaux et Catalyse, Université Djillali Labbes (Algèria)
- Stockholm University (Suècia)

Outputs de recerca i transferència: tesis, publicacions, congressos, etc.

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

4.6.1. Publicacions en revistes internacionals

Sole, RM; Pujol, MC; Massons, J; Aguilo, M; Diaz, F; Brenier, A in Growth, anisotropic spectroscopy and laser operation of the monoclinic Nd:KGd(PO₃)(4) crystal. JOURNAL OF PHYSICS D-APPLIED PHYSICS 2015, 48, 49.

Magre, M; Biosca, M; Norrby, PO; Pamies, O; Dieguez, M in Theoretical and Experimental Optimization of a New Amino Phosphite Ligand Library for Asymmetric Palladium-Catalyzed Allylic Substitution. CHEMCATCHEM 2015, 7, 4091-4107.

Perez-Barrado, E; Salagre, P; Marsal, LF; Aguilo, M; Cesteros, Y; Diaz, F; Pallares, J; Cucinotta, F; Marchese, L; Pujol, MC in Ultrasound-assisted reconstruction and delamination studies on CaAl layered double hydroxides. APPLIED CLAY SCIENCE 2015, 118, 116-123.

Martinez, J; Rodenas, A; Fernandez, T; de Aldana, JRV; Thomson, RR; Aguilo, M; Kar, AK; Solis, J; Diaz, F in 3D laser-written silica glass step-index high-contrast waveguides for the 3.5 μ m mid-infrared range. OPTICS LETTERS 2015, 40, 5818-5821.

de Mendivil, JM; del Hoyo, J; Solis, J; Pujol, MC; Aguilo, M; Diaz, F; Lifante, G in Mirrorless Yb³⁺-Doped Monoclinic Double Tungstate Waveguide Laser Combining Liquid Phase Epitaxy and Multiplexed Beam fs Laser Writing. JOURNAL OF LIGHTWAVE TECHNOLOGY 2015, 33, 4726-4730.

Loiko, P; Serres, JM; Mateos, X; Yumashev, K; Yasukevich, A; Petrov, V; Griebner, U; Aguilo, M; Diaz, F in Subnanosecond Tm:KLuW microchip laser Q-switched by a Cr:ZnS saturable absorber. OPTICS LETTERS 2015, 40, 5220-5223.

Koubaa, T; Dammak, M; Pujol, MC; Aguilo, M; Diaz, F in Optical spectroscopy of Eu³⁺ ions doped in KLu(WO₄)(2) single crystals. JOURNAL OF LUMINESCENCE 2015, 168, 7-13.

Borras, C; Biosca, M; Pamies, O; Dieguez, M in Iridium-Catalyzed Asymmetric Hydrogenation with Simple Cyclohexane-Based P/S Ligands: In Situ HP-NMR

and DFT Calculations for the Characterization of Reaction Intermediates. ORGANOMETALLICS 2015, 34, 5321-5334.

Loiko, PA; Dashkevich, VI; Bagaev, SN; Orlovich, VA; Mateos, X; Serres, JM; Vilejsnikova, EV; Yasukevich, AS; Yumashev, KV; Kuleshov, NV; Dunina, EB; Kornienko, AA; Vatnik, SM; Pavlyuk, AA in Judd-Ofelt analysis of spectroscopic properties of Eu³⁺:KLu(WO₄)₂ crystal. JOURNAL OF LUMINESCENCE 2015, 168, 102-108.

Delgado, JA; Castillon, S; Curulla-Ferre, D; Claver, C; Godard, C in Effect of pH on catalyst activity and selectivity in the aqueous Fischer-Tropsch synthesis catalyzed by cobalt nanoparticles. CATALYSIS COMMUNICATIONS 2015, 71, 88-92.

Tang, QQ; Abella, L; Hao, YJ; Li, XH; Wan, YB; Rodriguez-Forteza, A; Poblet, JM; Feng, L; Chen, N in Sc₂O@C-2v(5)-C-80: Dimetallic Oxide Cluster Inside a C-80 Fullerene Cage. INORGANIC CHEMISTRY 2015, 54, 9845-9852.

Civit, MG; Sanz, X; Vogels, CM; Bo, C; Westcott, SA; Fernandez, E in Ynones Merge Activation/Conjugate Addition of Chalcogenoborates ArE-Bpin (E= Se, S). ADVANCED SYNTHESIS & CATALYSIS 2015, 357, 3098-3103.

Skobelev, IY; Zalomaeva, OV; Kholdeeva, OA; Poblet, JM; Carbo, JJ in Mechanism of Thioether Oxidation over Di- and Tetrameric Ti Centres: Kinetic and DFT Studies Based on Model Ti-Containing Polyoxometalates. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 2015, 21, 14496-14506.

Carbo, JJ; Garcia-Lopez, D; Gonzalez-del Moral, O; Martin, A; Mena, M; Santamaria, C in Carbon-Nitrogen Bond Construction and Carbon-Oxygen Double Bond Cleavage on a Molecular Titanium Oxonitride: A Combined Experimental and Computational Study. INORGANIC CHEMISTRY 2015, 54, 9401-9412.

Serres, JM; Jambunathan, V; Mateos, X; Loiko, P; Lucianetti, A ; Mocek, T; Yumashev, K; Petrov, V; Griebner, U; Aguilo, M; Diaz, F in Graphene Q-Switched Compact Yb:YAG Laser. IEEE PHOTONICS JOURNAL 2015, 54, 7.

Asara, GG; Ricart, JM; Rodriguez, JA; Illas, F in Exploring the activity of a novel Au/TiC(001) model catalyst towards CO and CO₂ hydrogenation. SURFACE SCIENCE 2015, 640, 141-149.

Palau-Lluch, G; Fernandez, E in Synthesis of 2-Aryl-1,3-Cyclopentanediones through Catalytic Borylation as a Key Step. ASIAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY 2015, 4, 963-968.

Guo, WS; Gonzalez-Fabra, J; Bandeira, NAG; Bo, C; Kleij, AW in A Metal-Free Synthesis of N-Aryl Carbamates under Ambient Conditions. ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION 2015, 54, 11686-11690.

Gebretsadik, FB; Mance, D; Baldus, M; Salagre, P; Cesteros, Y in Microwave synthesis of delaminated acid saponites using quaternary ammonium salt or polymer as template. Study of pH influence. APPLIED CLAY SCIENCE 2015, 114, 20-30.

- Serres, JM; Mateos, X; Griebner, U; Petrov, V; Aguilo, M; Diaz, F in Single-layer graphene saturable absorber for diode-pumped passively Q-switched Tm:KLu(WO₄)₂ laser at 2 μ m. LASER PHYSICS LETTERS 2015, 12, 9.
- Loiko, PA; Yumashev, KV; Schodel, R; Peltz, M; Liebald, C; Mateos, X; Deppe, B; Krankel, C in Thermo-optic properties of Yb:Lu₂O₃ single crystals. APPLIED PHYSICS B-LASERS AND OPTICS 2015, 120, 601-607.
- de Mendivil, JM; Hoyo, J; Solis, J; Pujol, MC; Aguilo, M; Diaz, F; Lifante, G in Channel waveguide fabrication in KY(WO₄)₂ combining liquid-phase-epitaxy and beam-multiplexed femtosecond laser writing. OPTICAL MATERIALS 2015, 47, 304-309.
- de Mendivil, JM; Lifante, G; Pujol, MC; Aguilo, M; Diaz, F; Cantelar, E in Judd-Ofelt analysis and transition probabilities of Er³⁺ doped KY_{1-x}Gd_xLu_y(WO₄)₂ crystals. JOURNAL OF LUMINESCENCE 2015, 165, 153-158.
- Loiko, P; Serres, JM; Mateos, X; Yumashev, K; Malyarevich, A; Onushchenko, A; Petrov, V; Griebner, U; Aguilo, M; Diaz, F in Ho:KLu(WO₄)₂ Microchip Laser Q-Switched by a PbS Quantum-Dot-Doped Glass. IEEE PHOTONICS TECHNOLOGY LETTERS 2015, 27, 1795-1798.
- Savchuk, OA; Carvajal, JJ; Pujol, MC; Barrera, EW; Massons, J; Aguilo, M; Diaz, F in Ho,Yb:KLu(WO₄)₂ Nanoparticles: A Versatile Material for Multiple Thermal Sensing Purposes by Luminescent Thermometry. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C 2015, 119, 18546-18558.
- Plessow, PN; Carbo, JJ; Schafer, A; Hofmann, P in Selective Carbon-Carbon Bond Activation of Oxirane by a Bisphosphine Pt(0) Complex-A Theoretical Study. ORGANOMETALLICS 2015, 34, 3764-3773.
- Alegret, N; Abella, L; Azmani, K; Rodriguez-Forteza, A; Poblet, JM in Different Factors Govern Chlorination and Encapsulation in Fullerenes: The Case of C-66. INORGANIC CHEMISTRY 2015, 54, 7562-7570.
- Delgado, JA; Claver, C; Castillon, S; Curulla-Ferre, D; Godard, C in Correlation between Hydrocarbon Product Distribution and Solvent Composition in the Fischer-Tropsch Synthesis Catalyzed by Colloidal Cobalt Nanoparticles. ACS CATALYSIS 2015, 5, 4568-4578.
- Yang, T; Hao, YJ; Abella, L; Tang, QQ; Li, XH; Wan, YB; Rodriguez-Forteza, A; Poblet, JM; Feng, L; Chen, N in Sc₂O@T-d(19151)-C-76: Hindered Cluster Motion inside a Tetrahedral Carbon Cage Probed by Crystallographic and Computational Studies. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 2015, 21, 11110-11117.
- Errandonea, D; Pellicer-Porres, J; Pujol, MC; Carvajal, JJ; Aguilo, M in Room-temperature vibrational properties of potassium gadolinium double tungstate under compression up to 32 GPa. JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS 2015, 638, 14-20.
- Serres, JM; Loiko, PA; Mateos, X; Yumashev, KV; Kuleshov, NV; Petrov, V; Griebner, U; Aguilo, M; Diaz, F in Ho:KLuW microchip laser intracavity pumped by a

diode-pumped Tm:KLuW laser. APPLIED PHYSICS B-LASERS AND OPTICS 2015, 120, 123-128.

- Bandeira, NAG; Tytkowski, B; Bogdanowicz, KA; Giamberini, M; Bo, C in An atomistic insight into light-sensitive polymers with methylstilbene building blocks. POLYMER INTERNATIONAL 2015, 64, 935-941.
- Sanchez, O; Ruiz, X; Pujalte, M; Mercader, I; Batiste, O; Gavalda, J in On the determination of diffusion coefficients in two-component alloys and doped semiconductors. Several implications concerning the International Space Station. INTERNATIONAL JOURNAL OF HEAT AND MASS TRANSFER 2015, 86, 508-518.
- Yang, T; Nagase, S; Akasaka, T; Poblet, JM; Houk, KN; Ehara, M; Zhao, X in (2+2) Cycloaddition of Benzyne to Endohedral Metallofullerenes M₃N@C-80 (M = Sc, Y): A Rotating-Intermediate Mechanism. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 2015, 137, 6820-6828.
- Butt, MA; Nguyen, HD; Rodenas, A; Romero, C; Moreno, P; de Aldana, JRV; Aguiló, M; Sole, RM; Pujol, MC; Diaz, F in Low-repetition rate femtosecond laser writing of optical waveguides in KTP crystals: analysis of anisotropic refractive index changes. OPTICS EXPRESS 2015, 23, 15343-15355.
- Oreshkov, B; Veronesi, S; Tonelli, M; di Lieto, A; Petrov, V; Griebner, U; Mateos, X; Buchvarov, I in Tm³⁺: LiGdF₄ Laser, Passively Q-Switched With a Cr²⁺: ZnSe Saturable Absorber. IEEE PHOTONICS JOURNAL 2015, 7, 3.
- Bitlloch, P; Ruiz, X; Ramirez-Piscina, L; Casademunt, J in Turbulent Bubble Jets in Microgravity. Spatial Dispersion and Velocity Fluctuations. MICROGRAVITY SCIENCE AND TECHNOLOGY 2015, 27, 207-220.
- Serres, JM; Loiko, P; Mateos, X; Yumashev, K; Griebner, U; Petrov, V; Aguiló, M; Diaz, F in Tm:KLu(WO₄)₂ microchip laser Q-switched by a graphene-based saturable absorber. OPTICS EXPRESS 2015, 23, 14108-14113.
- Pamies, O; Dieguez, M; Backvall, JE in Artificial Metalloenzymes in Asymmetric Catalysis: Key Developments and Future Directions. ADVANCED SYNTHESIS & CATALYSIS 2015, 357, 1567-1586.
- Martinez-Ferrate, O; Britovsek, GJP; Claver, C; van Leeuwen, PWNM in C-H benzylic oxidation promoted by dinuclear iron DBDOC iminopyridine complexes. INORGANICA CHIMICA ACTA 2015, 431, 156-160.
- Wafra, N; Melgar, D; Haouas, M; Taulelle, F; Hijazi, A; Naoufal, D; Avalos, JB; Floquet, S; Bo, C; Cadot, E in Hydrophobic Effect as a Driving Force for Host-Guest Chemistry of a Multi-Receptor Keplerate-Type Capsule. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY 2015, 137, 5845-5851.
- Martinez-Rodriguez, L; Bandeira, NAG; Bo, C; Kleij, AW in Highly Efficient Chirality Transfer from Diamines Encapsulated within a Self-Assembled Calixarene-Salen Host. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 2015, 21, 7144-7150.

- Loiko, P; Mateos, X; Wang, YC; Pan, ZB; Yumashev, K; Zhang, HJ; Griebner, U; Petrov, V in Thermo-optic dispersion formulas for YCOB and GdCOB laser host crystals. OPTICAL MATERIALS EXPRESS 2015, 5, 1089-1097.
- Pena Carrodegua, Leticia; Gonzalez-Fabra, Joan; Castro-Gomez, Fernando; Bo, Carles; Kleij, Arjan W in Al(III) -catalysed formation of poly(limonene)carbonate: DFT analysis of the origin of stereoregularity. Chemistry 2015, 21, 6115-6122.
- Butt, MA; Pujol, MC; Sole, R; Rodenas, A; Lifante, G; Wilkinson, JS; Aguilo, M; Diaz, F in Channel waveguides and Mach-Zehnder structures on RbTiOPO₄ by Cs⁺ ion exchange. OPTICAL MATERIALS EXPRESS 2015, 5, 1183-1194.
- Butt, MA; Sole, R; Pujol, MC; Rodenas, A; Lifante, G; Choudhary, A; Murugan, GS; Shepherd, DP; Wilkinson, JS; Aguilo, M; Diaz, F in Fabrication of Y-Splitters and Mach-Zehnder Structures on (Yb,Nb):RbTiOPO₄/RbTiOPO₄ Epitaxial Layers by Reactive Ion Etching. JOURNAL OF LIGHTWAVE TECHNOLOGY 2015, 33, 1863-1871.
- Domingo, A; Angeli, C; de Graaf, C; Robert, V in Electronic Reorganization Triggered by Electron Transfer: The Intervalence Charge Transfer of a Fe³⁺/Fe²⁺ Bimetallic Complex. JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY 2015, 36, 861-869.
- Perveaux, A; Castro, PJ; Lauvergnat, D; Reguero, M; Lasorne, B in Intramolecular Charge Transfer in 4-Aminobenzonitrile Does Not Need the Twist and May Not Need the Bend. Journal of Physical Chemistry Letters 2015, 6, 1316-1320.
- Perez-Barrado, E; Pujol, MC; Aguilo, M; Llorca, J; Cesteros, Y; Diaz, F; Pallares, J; Marsal, LF; Salagre, P in Influence of acid-base properties of calcined MgAl and CaAl layered double hydroxides on the catalytic glycerol etherification to short-chain polyglycerols. CHEMICAL ENGINEERING JOURNAL 2015, 264, 547-556.
- Gomez, I; Castro, PJ; Reguero, M in Insight into the Mechanisms of Luminescence of Aminobenzonitrile and Dimethylaminobenzonitrile in Polar Solvents. An ab Initio Study. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A 2015, 119, 1983-1995.
- Dymshits, OS; Alekseeva, IP; Zhilin, AA; Tsenter, MY; Loiko, PA; Skoptsov, NA; Malyarevich, AM; Yumashev, KV; Mateos, X; Baranov, AV in Structural characteristics and spectral properties of novel transparent lithium aluminosilicate glass-ceramics containing (Er,Yb)NbO₄ nanocrystals. JOURNAL OF LUMINESCENCE 2015, 160, 337-345.
- Serres, JM; Loiko, P; Mateos, X; Yumashev, K; Kuleshov, N; Petrov, V; Griebner, U; Aguilo, M; Diaz, F in Prospects of monoclinic Yb:KLu(WO₄)₂ crystal for multi-watt microchip lasers. OPTICAL MATERIALS EXPRESS 2015, 5, 661-667.
- Aleksandrov, V; Gluth, A; Petrov, V; Buchvarov, I; Steinmeyer, G; Paajaste, J; Suomalainen, S; Harkonen, A; Guina, M; Mateos, X; Diaz, F; Griebner, U in Mode-

- locked Tm, Ho:KLu(WO₄)(2) laser at 2060 nm using InGaSb-based SESAMs. OPTICS EXPRESS 2015, 23, 4614-4619.
- Civit, MG; Sanz, X; Vogels, CM; Webb, JD; Geier, SJ; Decken, A; Bo, C; Westcott, SA; Fernandez, E in Thioboration of alpha,beta-Unsaturated Ketones and Aldehydes toward the Synthesis of beta-Sulfido Carbonyl Compounds. JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY 2015, 80, 2148-2154.
- Biosca, M; Paptchikhine, A; Pamies, O; Andersson, PG; Dieguez, M in Extending the Substrate Scope of Bicyclic P-Oxazoline/Thiazole Ligands for Ir-Catalyzed Hydrogenation of Unfunctionalized Olefins by Introducing a Biaryl Phosphoramidite Group. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 2015, 21, 3455-3464.
- Monakhov, KY; Linnenberg, O; Kozlowski, P; van Leusen, J; Besson, C; Secker, T; Ellern, A; Lopez, X; Poblet, JM; Kogerler, P in Supramolecular Recognition Influences Magnetism in [X@ (HV8V14O₅₄)-V-IV-O-V](6-) Self-Assemblies with Symmetry-Breaking Guest Anions. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL 2015, 21, 2387-2397.
- Palau-Lluch, G; Sanz, X; La Cascia, E; Civit, MG; Miratles, N; Cuenca, AB; Fernandez, E in Organocatalytic functionalisation through boron chemistry. PURE AND APPLIED CHEMISTRY 2015, 87, 181-193.
- Loiko, P; Serres, JM; Mateos, X; Yumashev, K; Kuleshov, N; Petrov, V; Griebner, U; Aguilo, M; Diaz, F in In-band-pumped Ho:KLu(WO₄)(2) microchip laser with 84% slope efficiency. OPTICS LETTERS 2015, 40, 344-347.
- Suaud, N; Lopez, X; Ben Amor, N; Bandeira, NAG; de Graaf, C; Poblet, JM in Accuracy of Embedded Fragment Calculation for Evaluating Electron Interactions in Mixed Valence Magnetic Systems: Study of 2e-Reduced Lindqvist Polyoxometalates. JOURNAL OF CHEMICAL THEORY AND COMPUTATION 2015, 11, 550-559.
- Ruiz, X; Saez, N; Gavalda, J; Pallares, J in On the impact of free surfaces on the measurement of diffusion coefficients in metallic binary alloys using shear cells. INTERNATIONAL JOURNAL OF HEAT AND MASS TRANSFER 2015, 81, 602-617.
- Zapata-Rivera, J; Caballol, R; Calzado, CJ in Electronic structure aspects of the complete O-2 transfer reaction between Ni(II) and Mn(II) complexes with cyclam ligands. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 2015, 17, 2814-2822.
- Gluth, A; Wang, YC; Petrov, V; Paajaste, J; Suomalainen, S; Harkonen, A; Guina, M; Steinmeyer, G; Mateos, X; Veronesi, S; Tonelli, M; Li, J; Pan, YB; Guo, JK; Griebner, U in GaSb-based SESAM mode-locked Tm:YAG ceramic laser at 2 mu m. OPTICS EXPRESS 2015, 23, 1361-1369.
- Alegret, N; Abella, L; Rodriguez-Fortea, A; Poblet, JM in Cubane oxides inside middle-size fullerenes: the next endohedrals to be detected?. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 2015, 134, 15.

- de Mendivil, JM; Rodenas, A; Benayas, A; Aguilo, M; Diaz, F; Delgado, AP; Lifante, G; Jaque, D; Kar, AK in Fluorescence imaging of lattice re-distribution on step-index direct laser written Nd:YAG waveguide lasers. JOURNAL OF APPLIED PHYSICS 2015, 117, 2.
- Westcott, SA; Fernandez, E in Singular Metal Activation of Diboron Compounds. ADVANCES IN ORGANOMETALLIC CHEMISTRY 2015, 63, 39-89.
- Orgue, S; Flores-Gaspar, A; Biosca, M; Pamies, O; Dieguez, M; Riera, A; Verdaguer, X in Stereospecific S(N)2@P reactions: novel access to bulky P-stereogenic ligands. CHEMICAL COMMUNICATIONS 2015, 51, 17548-17551.
- Cuenca, AB Cid, J; Garcia-Lopez, D; Carbo, JJ; Fernandez, E in Unsymmetrical 1,1-diborated multisubstituted sp(3)-carbons formed via a metal-free concerted-asynchronous mechanism. ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY 2015, 13, 11772-11772
- Castellbou, JL; Blondeau, P; Claver, C; Godard, C in Surface characterisation of phosphine and phosphite stabilised Rh nanoparticles: a model study. RSC ADVANCES 2015, 5, 97036-97043.
- Breso-Femenia, E; Godard, C; Claver, C; Chaudret, B; Castillon, S in Selective catalytic deuteration of phosphorus ligands using ruthenium nanoparticles: a new approach to gain information on ligand coordination. CHEMICAL COMMUNICATIONS 2015, 51, 1634-16345.
- Bandeira, NAG; Garai, S; Muller, A; Bo, C in The mechanism of CO₂ hydration: a porous metal oxide nanocapsule catalyst can mimic the biological carbonic anhydrase role. CHEMICAL COMMUNICATIONS 2015, 51, 15596-15599.
- Kaleta, J; Michl, J; Meziere, C; Simonov, S; Zorina, L; Wzietek, P; Rodriguez-Forte, A; Canadell, E; Batail, P in Gearing motion in cogwheel pairs of molecular rotors: weak-coupling limit. CRYSTENGCOMM 2015, 17, 7829-7834.
- Pubill-Ulldemolins, C; Fernanez, E; Bo, C; Brown, JM in Origins of observed reactivity and specificity in the addition of B₂Cl₄ and analogues to unsaturated compounds. ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY 2015, 13, 9619-9628.
- Cuenca, AB; Cid, J; Garcia-Lopez, D; Carbo, JJ; Fernandez, E in Unsymmetrical 1,1-diborated multisubstituted sp(3)-carbons formed via a metal-free concerted-asynchronous mechanism. ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY 2015, 13, 9659-9664.
- Miralles, N; Romero, RM; Fernandez, E; Muniz, K in A mild carbon-boron bond formation from diaryliodonium salts. CHEMICAL COMMUNICATIONS 215, 51, 14068-14071.
- Perveaux, A; Castro, PJ; Reguero, M; Meyer, HD; Gatti, F; Lasorne, B; Lauvergnat, D in Multidimensional Photochemistry Model: Application to Aminobenzonitrile and Benzopyran. ULTRAFast PHENOMENA XIX 2015, 162, 386-390.

- Moreno-Marrodan, C; Liguori, F; Mercade, E; Godard, C; Claver, C; Barbaro, P in A mild route to solid-supported rhodium nanoparticle catalysts and their application to the selective hydrogenation reaction of substituted arenes. CATALYSIS SCIENCE & TECHNOLOGY 2015, 5, 3762-3772.
- Pascual-Borras, M; Lopez, X; Poblet, JM in Accurate calculation of P-31 NMR chemical shifts in polyoxometalates. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 2015, 17, 8723-8731.
- Alvarez-Moreno, M; de Graaf, C; Lopez, N; Maseras,; Poblet, JM; Bo, C in Managing the Computational Chemistry Big Data Problem: The ioChem-BD Platform. JOURNAL OF CHEMICAL INFORMATION AND MODELING 2015, 55, 95-103.
- Martinez, A; Krinsky, JL; Penafiel, I; Castillon, S; Loponov, K; Lapkin, A; Godard, C; Claver, C in Heterogenization of Pd-NHC complexes onto a silica support and their application in Suzuki-Miyaura coupling under batch and continuous flow conditions. CATALYSIS SCIENCE & TECHNOLOGY 2015, 5, 310-319.
- Miralles, N; Cid, J; Cuenca, AB; Carbo, JJ; Fernandez, E in Mixed diboration of alkenes in a metal-free context. CHEMICAL COMMUNICATIONS 2015, 51, 1693-1696.
- La Cascia, E; Sanz, X; Bo, C; Whiting, A; Fernandez, E in Asymmetric metal free beta-boration of alpha,beta-unsaturated imines assisted by (S)-MeBoPhoz. ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY 2015, 13, 1328-1332.
- Magre, M; Biosca, M; Pamies, O; Dieguez, M in Filling the Gaps in the Challenging Asymmetric Hydroboration of 1,1-Disubstituted Alkenes with Simple Phosphite-Based Phosphinooxazoline Iridium Catalysts. CHEMCATCHEM 2015, 7, 114-120.
- Mulet-Gas, M; Abella, L; Dunk, PW; Rodriguez-Forteza, A; Kroto, HW; Poblet, JM in Small endohedral metallofullerenes: exploration of the structure and growth mechanism in the Ti@C-2n (2n=26-50) family. CHEMICAL SCIENCE 2015, 6, 675-686.
- Alcover-Fortuny, G; de Graaf, C; Caballol, R in Spin-crossover in phenylazopyridine-functionalized Ni-porphyrin: trans-cis isomerization triggered by pi-pi interactions. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS 2015, 17, 217-225.

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 (>90 comunicacions l'any 2015, amb un gran nombre de conferències invitades).

Tesis doctorals

S'han defensat 12 tesis doctorals llegides durant el període de juny del 2015 a maig del 2016, 11 de les quals amb menció europea o internacional. Dues tesis han estat realitzades a l'ICIQ.

Doctorand: Gerard Palau

Títol tesi: ALPHA,BETA-DIFUNCTIONALIZATION OF ALPHA,BETA-UNSATURATED CARBONYL COMPOUNDS THROUGH BORYLATION REACTION

Data defensa: 03/07/2015

Doctorat europeu/internacional: Sí

Directors: Maria Elena Fernández

Doctorand: Judith Cecilia Granados

Títol tesi: HYDROCALUMITE-BASED CATALYSTS FOR GLYCEROL REVALORIZATION

Data defensa: 24/07/2015

Doctorat europeu/internacional: Sí

Directors: Yolanda Cesteros i Maria Pilar Salagre

Doctorand: Lorenzo Mognon

Títol tesi: MONONUCLEAR AND HETEROTRINUCLEAR RUTHENIUM COMPLEXES: SYNTHESIS AND WATER OXIDATION ACTIVITY

Data defensa: 29/07/2015

Doctorat europeu/internacional: No

Directors: Antoni Llobet

Doctorand: Pedro Javier Castro

Títol tesi: ESTUDIO TEÓRICO DE MECANISMOS DE FOTOCROMISMO, FOTOMAGNETISMO Y LUMINISCENCIA EN COMPUESTOS ORGÁNICOS

Data defensa: 08/09/2015

Doctorat europeu/internacional: Sí

Directors: Maria del Mar Reguero

Doctorand: Laia Cuesta

Títol tesi: TOWARDS GREEN SYNTHESIS OF ORGANIC CARBONATES: UTILIZATION OF CO₂ AS A CHEMICAL FEEDSTOCK

Data defensa: 09/10/2015

Doctorat europeu/internacional: Sí

Directors: Anna Maria Masdeu

Doctorand: Xavier Sanz

Títol tesi: THEORETICAL AND EXPERIMENTAL UNDERSTANDING OF THE PULL-PUSH EFFECT ON THE SYNTHESIS OF ORGANO-BORANES, SULFIDES AND SELENIDES

Data defensa: 28/10/2015

Doctorat europeu/internacional: Sí

Directors: Carles Bo i Maria Elena Fernández

Doctorand: Elisabet Mercadé

Títol tesi: NITROGEN-BASED LIGANDS FOR IRON, ZINC AND COBALT CATALYZED SELECTIVE PROCESSES

Data defensa: 06/11/2015

Doctorat europeu/internacional: Sí

Directors: Cyril Godard i Maria del Carmen Claver

Doctorand: Fishea Bogale Gebretsadik

Títol tesi: SYNTHESIS OF ACID MESOPOROUS SAPONITES AND ITS APPLICATION IN CATALYTIC GLYCIDOL HYDROGENOLYSIS

Data defensa: 06/11/2015

Doctorat europeu/internacional: Sí

Directors: Yolanda Cesteros i Maria Pilar Salagre

Doctorand: Xueqiang Wang

Títol tesi: NI-CATALYZED FIXATION OF HETEROCUMULENES INTO ORGANIC MATTER AND C-H FUNCTIONALIZATION REACTIONS

Data defensa: 18/11/2015

Doctorat europeu/internacional: Sí

Directors: Ruben Francisco Martin

Doctorand: Joaquín Soriano

Títol tesi: HIGH NUCLEARITY POLYOXOMETALATES AS WATER OXIDATION CATALYSTS: FROM EXPERIMENTS TO THEORY

Data defensa: 31/03/2016

Doctorat europeu/internacional: Sí

Directors: Josep Maria Poblet i José Ramón Galán

Doctorand: Oleksandr Savchuk

Títol tesi: DEVELOPMENT OF NEW MATERIALS AND TECHNIQUES FOR LUMINESCENCE NANOTHERMOMETRY AND PHOTOTHERMAL CONVERSION

Data defensa: 13/05/2016

Doctorat europeu/internacional: Sí

Directors: Joan Josep Carvajal i Francisco Manuel Díaz

Doctorand: Sergi Saureu

Títol tesi: FROM MONONUCLEAR TO DINUCLEAR: MAGNETIC PROPERTIES OF TRANSITION METAL COMPLEXES

Data defensa: 13/05/2016

Doctorat europeu/internacional: Sí

Directors: Cornelis de Graaf

Activitats d'extensió

Conferències donades per científics visitants al Departament

Com és costum al nostre Departament s'han impartit diferents conferències a càrrec d'experts internacionals durant el curs 2015-16.

Activitats d'extensió

Xerrades divulgatives

Desenvolupament de temes d'interès científic relacionats amb la química. El caràcter d'aquestes xerrades és divulgatiu i estan preparades a un nivell adequat per a alumnes de 3r i 4t d'ESO i batxillerat. Les xerrades es poden dur a terme al mateix centre de secundària.

SEMINARIS A CENTRES DE SECUNDÀRIA

- «Superordinadors: un microscopi per a la química» – Carles Bo
- «Noves fonts d'energia» – Jaume Massons
- «L'efecte hivernacle» – Jaume Massons
- «Com fer un treball de recerca?» – Núria Ruiz
- «La llum: l'origen dels colors... i molt més!» – Mar Reguero

Visita al centre i realització de pràctiques demostratives

Visites a la Facultat de Química de grups petits d'alumnes (uns 15-20 com a màxim) per conèixer la Facultat en un dia de treball normal. Possibilitat d'organitzar alguna pràctica demostrativa als laboratoris de la Facultat.

PRÀCTIQUES DE LABORATORI

- Determinació del centre de masses
- Pila Daniell

Col·laboració en el plantejament dels treballs de recerca

La Facultat ofereix col·laboració a l'hora de plantejar els treballs de recerca en química i bioquímica (bibliografia, resolució d'algun problema experimental puntual, assessorament en el plantejament d'objectius...).

Premi de recerca en química

Premi atorgat per l'Associació Empresarial Química de Tarragona i la Facultat de Química de Tarragona. Va dirigit a alumnes de centres de secundària que hagin realitzat algun treball de recerca relacionat amb la química o la bioquímica.

Olimpíada de química

L'olimpíada de química és un programa del Ministeri d'Educació, Cultura i Esport en col·laboració amb l'Associació Nacional de Químics d'Espanya i la Reial Societat Espanyola de Química, iniciat l'any 1995, que es proposa estimular la creativitat

i l'interès per la química dels estudiants de darrer any de secundària. Cada any s'organitza a la Facultat de Química.

V 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, juntament amb l'Obra Social "la Caixa" durant tot el curs 2015-16.

S'han fet seminaris per als professors dels instituts participants (desembre del 2014), visites als centres (gener-abril del 2016) i una jornada final a Barcelona (CosmoCaixa) de presentació de resultats (maig del 2016).

Membres del Departament que hi han participat: Magdalena Aguiló, Maria Cinta Pujol i Rosa M. Solé.

Fem recerca

Participació en el programa organitzat per la Universitat Rovira i Virgili amb l'objectiu de despertar vocacions i incentivar l'interès per la recerca i la seva aplicació. L'objectiu és que els futurs estudiants preguin consciència de la viabilitat i la importància de la investigació científica i de les múltiples aplicacions que el coneixement ofert per un títol genera en aquest àmbit.

Durant el curs 2015-16 s'han ofert diferents 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'olimpíada de física de Catalunya

Fase catalana, organitzada per la Societat Catalana de Física, realitzada a Barcelona, Tarragona, Lleida i Girona el 6 de febrer del 2016. Destinada a seleccionar els alumnes d'ensenyament secundari (2n BAT) que representaran les universitats catalanes a la fase estatal, organitzada per la Real Sociedad Española de Física. D'aquesta segona prova, en sortiran els representats per a l'Olimpíada Internacional de Física.

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 les quals s'han realitzat tot un conjunt d'activitats (conferències, visites a empreses, taules rodones i documentals), encaminades a fomentar una pràctica de la química basada en els 12 principis de la química verda (13-19 d'abril del 2016).

Memòria econòmica del Departament de Química Física i Inorgànica

Any 2015

Estat 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	25.759,52	23.578,77	2.180,75
48	1.728,80	0,00	1.728,80
62	25.017,30	23.283,45	1.733,85
TOTAL	53.446,83	46.862,22	6.584,61

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, etc.

4800086 APORTACIÓ PLA ESTRATÈGIC			
TOTAL VINCULACIÓ	INGRESSOS	DESPESES	ROMANENT
2	4.516,19	2.898,93	1.617,26
62	1.950,00	1.859,63	90,37
TOTAL	6.466,19	4.758,56	1.707,63

El pressupost del Pla Estratègic ha cobert despeses de material de laboratori i material d'oficina.

4800354 OVH DEPARTAMENT QFII			
TOTAL VINCULACIÓ	INGRESSOS	DESPESES	ROMANENT
2	24.534,35	17.001,34	7.533,01
48	19.026,41	10.479,92	8.546,49
62	4.396,16	1.808,62	2.587,54
TOTAL	47.956,92	29.289,88	18.667,04

Els diners dels *overheads* generats per projectes dels professors d'aquest Departament han servit per fer pagaments de diversa índole com missatgeria de documents, material d'oficina, despeses de locomoció i mantenició per assistència a jornades i congressos, despeses per a accions protocol·làries i representatives, etc.

4800368 PACTE DE DEDICACIÓ			
TOTAL VINCULACIÓ	INGRESSOS	DESPESES	ROMANENT
2	1.683,59	1.683,59	0,00
48	72,00	72,00	0,00
62	1.093,83	1.078,95	14.88
TOTAL	2.849,42	2.834,54	14,88

Els diners destinats a premiar l'activitat acadèmica s'han utilitzat per a 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 i de representació, etc.