

PLA ESTRATÈGIC 2005-2007 DE L'INSTITUT DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

Girona, febrer 2005

INDEX

1. **Preàmbul**
2. **Introducció**
3. **Situació actual**
4. **Actuacions que es proposen**
   - **4.1. Actuacions pel que fa a l'estructura organitzativa de l'Institut**
   - **4.2. Actuacions pel que fa a la infraestructura**
   - **4.3. Actuacions en el camp de la docència**
   - **4.4. Actuacions en el camp de la recerca i la transferència del coneixement**
5. **Indicadors d'assoliment d'objectius**

1. Preàmbul

Es presenta a continuació el Pla estratègic de l'Institut de Química Computacional (IQC) de la Universitat de Girona (UdG) que ha estat elaborat pels membres de l'IQC i aprovat pel Consell de l'IQC. Aquest Pla estratègic ha de marcar les línies d'actuació fonamentalment pels propers tres anys, si bé en alguns casos les actuacions que es proposen es poden allargar durant uns quants anys més.

En aquest Pla estratègic s'identifiquen els punts forts i febles de l'IQC per establir, a partir d'una anàlisi de l'entorn en forma de possibles problemes i oportunitats, les actuacions a desenvolupar per intentar millorar l'organització del centre, els resultats de recerca, i les aportacions que pugui fer l'IQC al conjunt de la societat.

En aquest pla es redacta la reflexió estratègica de l'IQC i es concreta en accions de govern que s'hauran de desenvolupar en els propers tres anys. Es evident que per portar endavant caldrà l'esforç de tots. L'esforç del personal tècnic i d'administració per ser efectius en les seves tasques de gestió i manteniment i per facilitar la feina als investigadors de l'IQC. L'esforç dels estudiants de doctorat per desenvolupar amb entusiasme la seva recerca, oferir la seva ajuda en els diferents actes que organitza l'IQC i facilitar la integració dels estudiants de llicenciatura que s'incorporen a l'Institut. L'esforç dels investigadors sèniors i post-docs per orientar part de la seva recerca en una direcció que faciliti la consecució dels objectius que aquí es proposen, per convidar a investigadors joves o de prestigi reconegut que ens ajudin a mantenir un alt nivell de recerca i a renovar els nostres coneixements, i també per demanar projectes que permetin gaudir del finançament que necessita l'IQC per portar a terme la seva recerca. Finalment l'esforç de l'equip de direcció per mantenir el rumb que aquest Pla ens marca. Amb l'esforç de tots estic segur que aconseguirem les fites que en aquest Pla es proposen.

Miquel Solà
Director

2. Introducció

L'Institut de Química Computacional (IQC) és un Institut de recerca universitari creat d'acord amb la Llei 26/1984 del Parlament de Catalunya. La llavor inicial de l'Institut va ser l'anomenat Laboratori de Química Computacional (LQC) de la *Universitat de Girona (UdG)* que va iniciar la seva activitat abans de la creació oficial de la pròpia *Universitat de Girona*, el 31 de desembre de 1991. El 6 de juliol de 1992, la Comissió Gestora de la *Universitat de Girona* va acceptar iniciar la tramitació legal per a la creació de l'Institut de Química Computacional. Finalment i de forma oficial l'Institut de Química Computacional va iniciar la seva trajectòria el 30 de març de 1993 en una reunió del Consell provisional de l'Institut presidida pel rector de la *Universitat de Girona* en aquell moment, el Dr. Josep Nadal. Va ser creat i ha estat dirigit des de la seva fundació fins al juny de 2004 pel Dr. Ramon Carbó-Dorca. En aquests moments està dirigit pel Dr. Miquel Solà. En curts espais de temps també ha tingut com a directors en funcions els Drs. Emili Besalú (10/03 a 5/04) i Miquel Solà (11/94 a 02/95).

D'acord amb el Reglament de l'IQC de la *Universitat de Girona* aprovat el passat 5 de març de 2004 pel Consell de l'IQC i el dia 1 d'abril de 2004 pel Consell de Govern de la UdG, l'Institut de Química Computacional és una unitat interdisciplinar dedicada a la investigació científica i tècnica dins del camp de la química teòrica i computacional i en el punt d'intersecció de la química, la matemàtica i la informàtica. L'Institut pot organitzar i desenvolupar programes i estudis de doctorat i de postgrau i proporcionar assessorament científic i tècnic en l'àmbit de les seves competències.

Segons això, l'IQC ha de dur a terme dues tasques fonamentals, igualment importants i clarament diferenciades. Per una part, ha d'organitzar, coordinar i desenvolupar la recerca que en l'àmbit de la química teòrica i computacional (QTC) es faci a la UdG. Per una altra part, ha d'organitzar, coordinar i desenvolupar la docència de tercer cicle i cursos d'especialització que es facin a la UdG en el camp de la QTC. Com a institució, l'IQC té l'obligació de sol·licitar i reclamar els millors mitjans tècnics i humans possibles per tal que aquestes tasques es desenvolupin de la forma més eficient.

L'etapa fundacional i de consolidació de l'IQC (1993-2004) ha estat brillantment liderada pel Dr. Ramon Carbó-Dorca. Durant aquesta etapa, l'IQC ha fet bé els deures que tenia encomanats. En aquests moments, l'Institut desenvolupa una tasca investigadora de primer nivell reconeguda a diferents nivells en forma de concessió d'ajuts (grup consolidat de recerca, xarxa de química teòrica a nivell català i espanyol, projectes de recerca trianuals de l'estat, beques, ajuts per organitzar cursos i congressos...), premis científics (Monturiol, distincions, Antoni de Martí i Franquès, Sant Albert, premis extraordinaris de doctorat,...), visites de reconeguts científics en el camp de la QTC (Morokuma, Frenking, Ponec, Mezey, Cooper, Savin, Gropen, i tants d'altres) a l'IQC i fins i tot reconeixement social (premi gironí de l'any en l'apartat de Societat, 2004).

Recentment, la Generalitat ha aprovat la constitució del Centre de Referència en Química Teòrica del qual forma part l'IQC juntament amb altres 11 grups consolidats de recerca de Catalunya. Aquest ha estat un pas molt important pel reconeixement científic de l'IQC. En aquests moments l'IQC a part de ser membre del Centre de Referència en Química Teòrica del DURSI també participa en la Xarxa de Química Teòrica finançada pel DURSI i de la Red de Química Teórica y Computacional finançada pel MEC.

La qualitat i quantitat de recerca que es fa actualment a l'Institut és perfectament comparable a la d'altres laboratoris de dimensió semblant de Catalunya, de l'Estat Espanyol i d'Europa. Des del punt de vista de la docència de tercer cicle, l'IQC organitza un programa de doctorat interuniversitari en col·laboració amb 20 universitats espanyoles que és un dels tres programes de doctorat de la UdG que han aconseguit el segell de la menció de qualitat del Ministeri de Cultura. També ha participat recentment, juntament amb altres 46 universitats europees, en l'elaboració de la proposta de màster "Theoretical Chemistry and Computational Modelling (TCCM)" que s'ha presentat a la darrera convocatòria d'Erasmus Mundus de la Unió Europea i que dissortadament ha estat denegada.

Malgrat que hi ha moltes coses a millorar i precisament aquest pla estratègic

incideix en els aspectes millorables, l'IQC representa ara per ara una estructura de recerca i acadèmica de primer ordre. Tot això ha estat possible, no cal dir-ho, gràcies a l'esforç conjunt de la direcció de l'IQC, del personal acadèmic, del personal d'administració i serveis i dels estudiants de tercer cicle que han treballat a l'Institut durant aquests darrers anys i, en particular pel que fa als resultats de recerca, dels estudiants de doctorat que han desenvolupat la seva Tesi a l'Institut i dels directors dels seus treballs de recerca.

Tenint en compte aquest context general, aquest document recull les actuacions previstes pel trienni 2005-2007. Aquest conjunt de propostes neix de la voluntat que tenen els membres de l'IQC de fer evolucionar el seu Institut i amb la idea d'aprofitar la situació actual per mirar de fer realitat aquest projecte.

Figura 1. Una foto recent d'una bona part dels membres de l'Institut de Química Computacional.



3. Situació actual

En aquest moment, a l'Institut treballen com a personal acadèmic sis funcionaris (tres catedràtics i tres professors titulars), sis doctors contractats a temps complet (un investigador ICREA, un professor lector, un professor associat a temps complet A3.TC, dos contractats pel programa Ramón y Cajal, i un post-doc), i vuit becaris de diferents administracions (tres del DURSI, dos del MECD, un de l'antic MCyT i un de la UdG), a més de quatre llicenciats que cursen estudis de tercer cicle, dos d'ells amb contracte a temps parcial, i dos més sense contracte ni beca. Hi ha tres estudiants de 2n cicle que gaudeixen de beques de col.laboració. Com a personal d'administració i serveis, l'Institut té una auxiliar administrativa a temps complet i un tècnic informàtic a temps parcial; també pot disposar parcialment del suport d'un laborant assignat a l'àrea de Química Física. A efectes de recerca, el personal acadèmic es troba integrat en dos grups de recerca: el grup de recerca en Enginyeria Molecular Quàntica (EMQ) i el grup de recerca en Modelatge Molecular i Metodologia Mecanoquàntica (M^4). Aquests dos grups conjuntament constitueixen un grup de recerca consolidat de la Generalitat de Catalunya des de l'any 1997. Amb anterioritat els anys 1994 i 1997 havien rebut el qualificatiu de grup de qualitat (DOGC del 14/12/94 i del 26/1/96).

La internacionalització del personal de l'Institut es manifesta per la nacionalitat de quatre dels seus components actuals: 2 de Rússia, 1 de Kazakhstan i 1 de Mèxic, fet que comporta que la llengua de relació, en els assumptes relacionats amb la recerca, sigui l'anglès. L'organització actual de l'IQC es mostra en el gràfic de la pàgina següent.

Figura 2. La seu de l'Institut de Química Computacional es troba a la Facultat de Ciències.

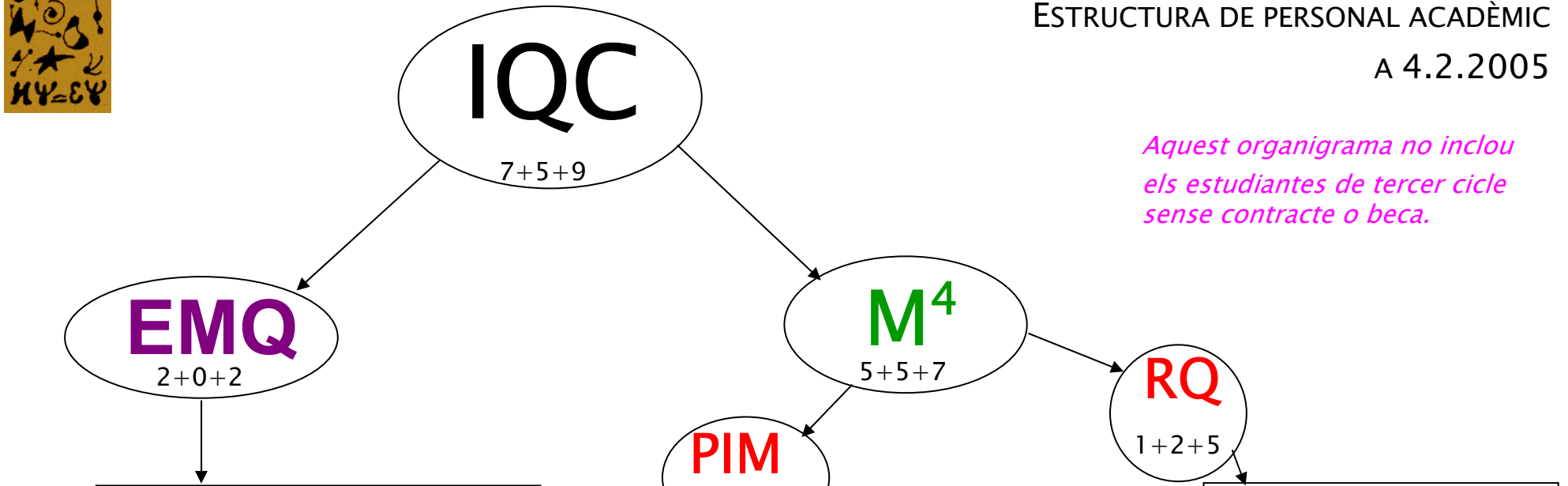


INSTITUT DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

ESTRUCTURA DE PERSONAL ACADÈMIC

A 4.2.2005

Aquest organigrama no inclou els estudiantes de tercer cicle sense contracte o beca.



RAMON CARBÓ-DORCA (CU)
EMILI BESALÚ (TU)
JOAQUIM CHAVES (A2.6)
JUANMA BARROSO (A2.6)

MIQUEL DURAN (CU)
ALEXANDER VOYTIUK (ICREA)
SÍLVIA SIMON (TU)
JOAN MIRÓ (TU)
JOSEP M. LUIS (LECTOR)
PEDRO SALVADOR (A3.TC)
MIQUEL TORRENT (POSTDOC)
DAVID HUGAS (BFPI)

MIQUEL SOLA (CU)
LLUIS BLANCAFORT (RYC)
SERGEI VYBOISHCHIKOV (RYC)
ALBERT POATER (BFU)
EDUARD MATITO (BFU)
MIREIA GÜELL (BFI)
OSCAR JIMÉNEZ HALLA (BFI)

Magnitud dels grups: x + y + z

x: Funcionaris + ICREAs

y: Drs. contractats a temps complet

z: Becaris o prof. contractats predoctorals

IQC: Institut de Química Computacional

EMQ: Grup de Recerca en Enginyeria Molecular Quàntica

M⁴: Grup de Recerca en Modelatge Molecular i Metodologia Mecanoquàntica

PIM: Subgrup de Propietats i Interaccions Moleculars

RQ: Subgrup de Reactivitat Química

CU: Catedràtic de Universitat

ICREA: Investigador contractat per l'ICREA

TU: Professor Titular de Universitat

LECTOR: Professor Lector

A3.TC: Professor Associat a temps complet, nivell 3 Doctor

RyC: Contractat del programa Ramon y Cajal

BFI: Becari de la Generalitat de Catalunya

BFU: Becari del MECD

BFPI: Becari del MCyT

BUdG: Becari de la Universitat de Girona

Pel que fa a les línies de recerca, l'Institut té en aquest moment 17 sublínies de recerca agrupades en 4 grans línies de recerca que són:

ENGINYERIA MOLECULAR (EMQ)

L00 Fonaments matemàtics de la química quàntica.
L01 Teoria de mesures de semblança sobre funcions de densitat.
L02 Tècnica de rotacions elementals de Jacobi per al càlcul de les funcions d'ona.
L03 Aplicacions de la semblança molecular a problemes químics i farmacològics.
L04 Teoria de càlculs en paral·lel i intel·ligència artificial.
L16 Química Matemàtica.
L17 Limnologia Física.

PROPIETATS I INTERACCIONS MOLECULARS (PIM)

L05 Densitats bielectròniques.
L06 Interaccions moleculars febles.
L07 Propietats elèctriques i òptiques lineals i no lineals.
L09 Efecte de l'entorn.
L10 Funcions flotants.

REACTIVITAT QUÍMICA (RQ)

L08 Mecanismes de reacció.
L11 Estructura Molecular.
L12 Enllaç de València.
L13 Química Organometàl·lica.
L15 Estructura i reactivitat dels ful·lerens.
L18 Reactivitat fotoquímica, fotofísica i processos no adiabàtics

ALTRES

L14 Divulgació.

En 3 d'aquestes línies (L04, L10 i L17) no s'ha publicat cap article en els darrers cinc anys. 4 d'aquestes línies no agrupen més de cinc articles (L02, L04, L10 i L17). Sembla oportú, per tant, fer una redefinició de les línies de recerca de l'IQC.

Des d'un punt de vista de producció científica, entre el període de cinc anys que va del 1998 fins a finals del 2002, els membres de l'IQC han publicat 181 articles i han defensat vuit Tesis Doctorals, de les quals, quatre han rebut el premi extraordinari de doctorat en Química de la *Universitat de Girona*. Un altre aspecte molt destacable és la quantitat d'investigadors visitants que té l'Institut cada any, i que dóna idea del prestigi internacional assolit. En concret, durant els anys 1998-2002, 43 investigadors estrangers han fet una estada superior als 15 dies a l'IQC. També a comentar el fet que segons el Web of Knowledge del *Institut for Scientific Information* (ISI) dels 50 articles més citats fets a la UdG, només 16 no han estat elaborats per membres de l'IQC. Queda, per tant, manifesta la importància de la recerca de l'IQC en el global de la UdG. Igualment, 4 dels 6 articles de la UdG més citats, etiquetats com a "highly cited" i mencionats als Essential Science Indicators són de l'IQC. També cal mencionar que, en l'estudi de Rovira et al. sobre el Mapa d'Excel·lència de la Física i Química a Espanya (1981-2000), els dos articles de la UdG que hi apareixen són de l'IQC.

L'IQC no només destaca a nivell de la UdG. Els indicadors de la Taula I que permeten comparar els 12 grups de recerca que formen part del Centre de Referència en Química Teòrica de Catalunya (CReQTeoCAT) mostren que l'IQC porta a terme una recerca, pel que fa a resultats en forma de publicacions i Tesis, de nivell semblant o superior a grups de recerca de Barcelona, Lleida o Tarragona. L'IQC també fa un paper molt digne a nivell de l'Estat Espanyol tal com mostren els indicadors de la Taula II que permeten comparar les 18 universitats que participen en el programa de doctorat interuniversitari *Química Teórica y Computacional*. En particular, a nivell de l'Estat Espanyol, l'IQC és líder en el número de articles publicats per doctor, i es manté a la banda alta pel que fa al número de Tesis llegides per doctor en el període 1998-2002. De l'observació de les dues taules, s'observa que si algun aspecte és millorable, és el del percentatge d'articles publicats en revistes de l'ISI respecte al número total de publicacions, que és el més baix dels grups que es comparen en la Taula I i de les universitats analitzades en la Taula II.

Taula I. Comparativa (anys 2000-2004) entre els grups de recerca de les universitats catalanes que formen part del Centre de Referència en Química Teòrica de Catalunya (CReQTeoCAT). Les dades s'han extret de la memòria per a la creació del CReQTeoCAT redactada el novembre de 2004.

Grups de recerca	Responsable	Invest. doctors	Articles publicats[1]	Articles ISI publicats[2]
Grup de Química Quàntica de Materials	Francesc Illas	9	79 (8,8)	77 (97,5)
Grup d'Estructura Electrònica	Santiago Álvarez	10	102 (10,2)	100 (98,0)
Grup de Cinètica i Dinàmica de les Reaccions Elementals	Antonio Aguilar	10	69 (6,9)	67 (97,1)
Grup de Dinàmica No Lineal	Francesc Sagués	2	12 (6)	12 (100)
Grup de Química Teòrica i Computacional	Josep M. Bofill Santiago Olivella	5	50 (10)	49 (98)
Grup de Físico-Química de Sistemes Macromoleculars	Francesc Mas Jaume Puy	8	41 (5,1)	41 (100)
Grup de Bioquímica i Terapia del Càncer	Marta Cascante	2	44 (22)	43 (97,7)
Grup de Dinàmica i Mecanismes de Reaccions Químiques	Josep M. Lluch	7	54 (7,7)	49 (90,7)
Grup de Modelització Molecular amb Metalls de Transició	Agustí Lledós	7	76 (10,9)	71 (93,4)
Grup d'Estructura i Reactivitat Química	Joan Bertran	7	58 (8,3)	53 (91,4)
Grup de Química Quàntica	Rosa Caballol	10	71 (7,1)	65 (91,5)
Institut de Química Computacional	Ramon Carbó-Dorca	12	183 (15,3)	154 (88,4)

[1] Entre parèntesi es dóna el número per doctor
[2] Entre parèntesi es dóna el percentatge respecte al total

Taula II. Comparativa (anys 1998-2002) entre els grups de recerca de les universitats espanyoles que participen en el programa de doctorat interuniversitari *Química Teórica y Computacional*. Les dades s'han extret de la petició de menció de qualitat de l'any 2003.

Universitat	Investig. doctors	Articles publicats[1]	Articles ISI publicats[2]	Tesis doctorals[1]
Girona	10	181 (18,1)	148 (81,8)	8 (0,80)
Autònoma de Barcelona	15	166 (11.1)	151 (91,0)	15 (1,00)
Autónoma de Madrid	9	146 (16,2)	141 (96,6)	9 (1,00)
Barcelona	17	234 (13,8)	219 (93,6)	13 (0,76)
Complutense de Madrid	14	94 (6,7)	92 (97,9)	4 (0,29)
Cantàbria	4	45 (11,3)	40 (88,9)	2 (0,50)
Extremadura	12	56 (4,7)	48 (85,7)	2 (0,17)
Granada	3	37 (12,3)	36 (97,3)	1 (0,33)
Illes Balears	5	25 (5,0)	25 (100)	1 (0,20)
Jaume I	14	127 (9,1)	123 (96,9)	6 (0,43)
Oviedo	18	135 (7,5)	129 (95,6)	9 (0,50)
País Vasc	5	65 (13,0)	61 (93,8)	3 (0,60)
Rovira i Virgili	8	61 (7,6)	58 (95,1)	2 (0,25)
Salamanca	5	23 (4,6)	19 (82,6))	0 (0,00)
Santiago de Compostela	8	58 (7,3)	58 (100)	5 (0,63)
Sevilla	8	81 (10,1)	76 (93,8)	6 (0,75)
Valencia	22	179 (8,1)	168 (93,9)	4 (0,18)
Valladolid	7	65 (9,3)	57 (87,7)	3 (0,43)

[1] Entre parèntesi es dóna el número per doctor
[2] Entre parèntesi es dóna el percentatge respecte al total

També és important ressaltar que dels vuit doctors que s'han doctorat en l'IQC en aquest període i que han deixat la carrera docent i investigadora a la universitat per ingressar a la empresa privada, tres s'han incorporat a empreses farmacèutiques estrangeres com a investigadors en química computacional. Es el cas del Dr. Xavier Fradera que treballa a Organon a Newhouse (Escòcia), la Dra. Mariazel Torrent que investiga a l'empresa Merck a West Point (Estats Units) i el Dr. Xavier Gironés que treballa a AstraZeneca a Goteborg (Suècia). Abans ja ho havia fer el Dr. Jordi Mestres que va treballar a l'empresa Organon i que recentment s'ha reincorporat a la xarxa de recerca pública a través de l'IMIM.

Un altre indici de qualitat és el número de cites rebudes. Per això es poden utilitzar les dades del quinquenni 1994-1998 sobre els grups que treballen en el camp de la Química Física a Catalunya. Aquestes dades que es recullen a la Taula II s'han extret d'un informe bibliomètric del Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació de la Generalitat de Catalunya (dursi.gencat.es/ca/re/bibliometria.htm). Es pot veure que els grups de l'IQC són els que tenen un número de cites per article més alt durant aquest període.

A grans trets, d'aquesta anàlisi de la situació actual se'n pot extreure que l'IQC és segurament una de les institucions de la UdG amb més prestigi en l'àmbit científic i tecnològic. Cal, però, no adormir-se ni estancar-se perquè a la UdG hi ha grups molt bons, que han progressat molt i que estan fent una recerca de gran qualitat, alguns d'ells dins del mateix Departament de Química. A nivell de Catalunya o de l'Estat Espanyol, l'IQC és comparable als millors grups de recerca que es dediquen a la QTC.

Taula II. Comparativa pel quinquenni 1994-1998 entre las universitats que tenen grups que treballen en Química Física a Catalunya.

Universitat	Articles publicats (A)	Cites rebudes (B)	Relació B/A
Girona	38	194	5,1
Autònoma de Barcelona	198	587	3,0
Barcelona	368	1199	3,3
Politècnica de Catalunya	111	369	3,3
Rovira i Virgili	73	332	4,5

4. Actuacions que es proposen

Malgrat que amb els anys l'IQC ha assolit una posició privilegiada a nivell de la UdG i de la química teòrica a nivell estatal cal continuar progressant amb la idea que hem d'aconseguir fer de l'IQC un centre de referència a nivell europeu. Per això aquestes són les mesures que proposem endegar en tres àmbits d'actuació: estructura organitzativa, infraestructures, docència i recerca.

4.1. Actuacions pel que fa a l'estructura organitzativa de l'Institut

En aquests moments a l'IQC hi ha dos grups de recerca, el GRCT19 d'Enginyeria Molecular Quàntica i el GRCT61 de Modelatge Molecular i Metodologia Mecanoquàntica. Aprofitant la propera convocatòria de grups de recerca consolidats de la Generalitat de Catalunya que sembla que apostarà per consolidar només aquells que tenen una mida considerable, i també tenint en compte que en la seva normativa la UdG impedeix que un grup de recerca consolidat pugui estar format per més d'un grup de recerca UdG, caldria redefinir la política de grups de l'Institut i crear un únic grup de recerca.

L'Institut de Química Computacional és un Institut de recerca universitari. Com a tal, una bona part dels investigadors que hi treballen són professors d'universitat que tenen la doble tasca docent i investigadora. Si bé en els últims anys s'ha obert la porta per poder incorporar investigadors a temps complet, pensem que una bona opció per ampliar el nombre d'investigadors que treballen a l'Institut podria passar per transformar-lo en un Institut mixt Universitat-CSIC. Per això caldria endegar abans una col·laboració durant uns anys amb algun centre del CSIC transformant primer l'IQC en una unitat associada al CSIC (en aquests moments a Espanya hi ha unes 40 unitats associades). El fet que hi hagi pocs centres del CSIC a Catalunya i que no hi hagi cap a Girona podria facilitar l'operació. Un dels centres del CSIC al que es podria associar l'IQC per afinitat investigadora i també perquè està geogràficament proper a l'IQC és el Institut de Ciències dels Materials de Barcelona (ICMAB) amb el qual ja s'han fet

algunes col·laboracions en el tema de la química dels ful·lerens. A més, l'ICMAB té investigadors treballant en el camp de les propietats òptiques no lineals i en química organometàl·lica. En tots aquests temes es podrien endegar col·laboracions entre l'IQC i l'ICMAB.

A nivell de la Universitat de Girona, una dels aspectes que s'ha criticat de l'IQC és la seva manca de interdisciplinarietat. Certament, els Instituts de recerca de la UdG, en general, apleguen investigadors de diferents àrees de coneixement que fan recerca sobre un tema comú. En aquest sentit, pensem que seria convenient convidar a grups de recerca afins a la temàtica de recerca de l'IQC a incorporar-se a l'Institut. Entre els grups de la UdG que podrien estar interessats en formar part de l'IQC hi ha el grup GRCT57 de Modelització Matemàtica de Processos Químics. També es pot pensar en incorporar membres del Dept. de Física que treballen en aspectes teòrics de la termodinàmica. Fins i tot es podria pensar en ampliar l'abast de l'IQC i fer-lo interuniversitari.

A nivell de pressupost, creiem que la contribució de l'IQC al pressupost de la UdG en forma de Tesis llegides i trams de recerca dels seus investigadors és clarament molt més alta que no pas el que l'IQC rep de la Universitat (1 sol becari UdG concedit en els últims cinc anys). Sense creure que hem de rebre exactament la mateixa quantitat del pressupost que generem, sí que ens sembla correcte exigir que hi hagi menys diferència entre el que aporta l'IQC i el que rep.

<u>Pel que fa a l'estructura organitzativa de l'Institut cal:</u>

- Aprofitar la propera convocatòria de grups consolidats de recerca per constituir dins l'IQC un únic grup de recerca anomenat "Química Teòrica i Modelatge Molecular" que agrupi les diferents línies de recerca que es fan a l'Institut. El cap del grup en cada moment serà el director de l'Institut. La nova estructura organitzativa que es proposa tenint en compte això es troba a l'annex I, que comporta quatre seccions en l'esperit de l'article 32 del vigent Reglament de l'IQC. L'assignació d'investigadors a seccions vindrà donada en cada moment per la composició real dels equips investigadors dels projectes finançats per via

competitiva.

- Iniciar els contactes i tràmits administratius necessaris per transformar l'IQC en un Institut mixt Universitat-CSIC.
- Convidar i incorporar, si és possible, grups de recerca de la UdG que per la temàtica que tracten podrien estar interessats en formar part de l'IQC, com ara el grup GRCT57 de "Modelització Matemàtica de Processos Químics".
- Iniciar una política d'avaluació per objectius dels membres i les línies de recerca de l'IQC. Crear una comissió d'avaluació que dugui a terme aquesta tasca.
- Procedir a l'avaluació institucional de l'IQC, juntament amb la resta dels centres investigadors de la UdG, que permeti plantejar objectius realistes i també anar en la línia de finançament per objectius i per rendiment.
- Reclamar una major contribució de la UdG al pressupost de l'IQC per tal de reduir la diferència entre la seva contribució al pressupost total i el que finalment rep l'IQC.

4.2. Actuacions pel que fa a la infraestructura

Un dels problemes més greus que pateix l'Institut en aquests moments és la manca d'espai de recerca. L'Institut ha rebut recentment dos investigadors RyC i un investigador ICREA que treballen a l'IQC a temps complet. Està previst que en els propers anys s'incorporin més investigadors amb contractes d'aquest tipus i amb contractes "Juan de la Cierva (JdlC)". A tot això cal afegir que normalment tenim dos o tres estudiants de llicenciatura que fan treballs experimentals durant aproximadament 6 mesos i que necessiten un espai per treballar. A més, l'IQC rep aproximadament la visita anual d'uns 10 investigadors estrangers que fan estades d'entre quinze dies i un any a l'Institut. En aquestes condicions, la situació pel que fa a espais disponibles és francament dolenta i si en aquests moments és encara suportable és perquè disposem de dos despatxos cedits per 2 o 3 anys per la Facultat i pel Departament, respectivament. Es urgent que l'IQC pugui disposar de més espai per fer la seva recerca per evitar que la manca d'aquest espai pugui afectar la seva productivitat científica futura.

Pels investigadors de l'IQC, la eina fonamental de treball en el laboratori és l'ordinador. L'avenç espectacular del maquinari obliga a una renovació constant dels ordinadors de què disposa l'IQC per tal que els seus investigadors puguin realitzar els estudis computacionals que plantegen en els seus projectes de recerca. Cal assegurar un finançament suficient per aconseguir renovar el maquinari a disposició dels investigadors de l'IQC cada tres anys. Per un altre costat, la manca d'espai fa que les màquines de càlcul de l'IQC hagin d'estar en aquests moments instal·lades al Servei Informàtic de la UdG. Per facilitar el seu manteniment ens caldrien uns 30 m^2 refrigerats situats a prop de l'IQC.

Pel que fa a la infraestructura cal:

- Reclamar 450 m^2 (15m^2 x 18 investigadors permanents + 150 m^2 per estudiants de doctorat i col·laboradors + 30 m^2 per maquinari) al nou edifici de recerca que està previst construir al Parc Científic i Tecnològic com espai per a despatxos i laboratoris de recerca de l'IQC.
- Mentre aquest edifici no estigui construït, continuar reclamant a la Facultat més espai per l'IQC.
- Aconseguir el finançament necessari per poder renovar les màquines de càlcul cada tres anys com a mínim i mantenir els ordinadors personals a un nivell de funcionament acceptable.

4.3. Actuacions en el camp de la docència

En el model actual, l'IQC com a tal només pot fer docència de tercer cicle i per tant només pot plantejar-se oferir màsters i dirigir Tesis Doctorals. Durant el mes de gener de 2005, el Ministeri d'Educació i Ciència ha aprovat el decret de postgrau que regula la docència que s'imparteix en els màsters i els doctorats. Segons aquest decret, el doctorat consistirà únicament en el treball de recerca que es presenta al final del període doctoral en forma de Tesi Doctoral. Els cursos teòrics desapareixen dels programes de doctorat, si bé per accedir al doctorat caldrà haver cursat un mínim de

300 crèdits ECTS, 180 o 240 ECTS en forma de grau i la resta en forma de màster. Tots aquests canvis s'han de produir abans del 2010. Per aquesta raó des de l'IQC s'aposta per mantenir el programa de doctorat "Química Teòrica i Computacional durant un o dos cursos més i mentrestant treballar per tal que la seva conversió a màster sigui viable. En aquest sentit, l'IQC aposta per implicar-se en el màster "Theoretical Chemistry and Computational Modelling (TCCM)" que amb coordinació amb una cinquantena d'universitats europees es començarà a impartir probablement a partir del curs 2005-06.

L'esforç docent que implica la posada en marxa del màster en TCCM per part de membres de l'IQC serà òbviament mínim. Per aquesta raó, des de l'IQC, es defensarà i s'incentivarà la participació dels membres de l'IQC en altres màsters organitzats per la Facultat de Ciències o pel Departament de Química, per tal que la capacitat docent que tenen els professors de l'Institut no es vegi manifestament infrautilitzada.

El nombre d'estudiants que entren a fer la llicenciatura de Química a la UdG s'ha reduït en els darrers cinc anys en més d'un 50% passant dels 100 estudiants que teníem a finals dels 90 fins aproximadament als 40 que tenim enguany. Aquesta davallada necessàriament implicarà una reducció del nombre d'estudiants de tercer cicle que facin la Tesi Doctoral a l'IQC. Per evitar que això es produeixi caldrà incentivar l'arribada d'estudiants estrangers, principalment dels que provenen de l'Amèrica Llatina, països de l'Est i Àsia.

<u>Pel que fa a la docència cal:</u>

- Implicar-se en l'organització del màster "Theoretical Chemistry and Computational Modelling (TCCM)".
- Col·laborar en la creació de màsters organitzats per la Facultat de Ciències o el Departament de Química que tinguin una temàtica afí a la recerca que es duu a terme a l'IQC.
- Fer una política de donar-se a conèixer a l'estranger amb especial dedicació a l'Amèrica Llatina, països de l'Est i Àsia per intentar atraure estudiants que vulguin

fer la Tesi a l'IQC. Establir col·laboracions amb laboratoris d'aquests països per facilitar la possibilitat d'atraure estudiants.

- Incentivar als estudiants dels últims anys de carrera a fer treballs experimentals i/o recerca en els grups de l'IQC. Per això l'IQC convocarà dues beques anuals per un import aproximat de 1200 € cadascuna per estudiants de tercer o quart per fer recerca durant sis mesos (de gener a juny) en algun dels grups de l'IQC fent servir els diners del retro-cànon.
- Participar en activitats de Comunicació, Didàctica i Divulgació de la Química i de la Ciència, tant en accions realitzades per membres de l'IQC, com en col·laboració amb altres Instituts i Departaments, en particular, amb el Departament de Química per tal de millorar la percepció social de la química i ajudar a incrementar el nombre d'estudiants d'entrada a la llicenciatura de Química.

4.4. Actuacions en el camp de la recerca i la transferència del coneixement

Un primer aspecte que sobta en veure les línies de recerca del nostre Institut és la gran quantitat de línies que es porten conjuntament. Analitzant les dades de les publicacions de l'IQC ja es veu que algunes de les línies existents s'han abandonat o s'investiguen de manera molt puntual. Per altre costat, l'arribada de nous investigadors a temps complet ha, en alguns casos, reforçat determinades línies de recerca i en d'altres senzillament ha suposat un increment del nombre de línies de recerca. Donada la situació actual, sembla per tant molt oportú i fins i tot necessari aprofitar aquest pla estratègic per fer una redefinició de les línies de recerca de l'IQC.

Repassant les publicacions dels darrers anys queda molt clar que el tipus de recerca que es fa a l'Institut es fonamentalment recerca bàsica i, exceptuant alguns casos com els estudis de tipus QSAR o QSPR, té poca aplicabilitat pràctica. Els investigadors de l'IQC han de fer un esforç per, sense deixar de fer la seva recerca bàsica, incrementar les interaccions amb la química experimental de la mateixa UdG i de centres externs a la UdG (per exemple, amb el ICMAB - no n'hi ha prou només amb col·laboracions amb altres químics teòrics) i, si és possible, amb el món de l'empresa.

Si volem millorar la capacitat investigadora de l'IQC i transformar-lo en un centre de referència de la química computacional del sud d'Europa, també caldrà incorporar més investigadors en forma d'estudiants graduats, post-docs, JdlC, RyCs, ICREAs i professors visitants. Seria bo que un número important d'aquests investigadors provinguessin del món de la física o la matemàtica per tal d'aconseguir un equip investigador molt més pluridisciplinar. Centrar la recerca en aspectes més pràctics i d'aplicació tecnològica, ens ha de permetre obtenir més projectes europeus (l'IQC en els darrers 10 anys només ha participat en dos d'aquests projectes) i aconseguir contractes amb l'empresa privada (l'IQC en els darrers cinc anys ha aconseguit un únic contracte amb l'empresa d'uns 6000 €).

Un aspecte molt positiu de l'IQC és l'elevada mobilitat dels seus investigadors, especialment dels més joves, i també l'elevat nombre d'investigadors estrangers, alguns d'ells de gran renom, que ens visiten. Això permet als investigadors renovar de forma contínua els seus coneixements i dota l'Institut d'un ambient científic altament estimulant. Un altre aspecte a destacar és l'organització periòdica de reunions científiques a nivell intern que es desenvolupen normalment en anglès i també l'organització aproximadament cada dos anys de congressos internacionals.

<u>Pel que fa a la recerca cal:</u>

- Redefinir les línies de recerca de l'IQC (veure annex II) i demanar que tots els seus membres treballin a temps complet o parcial en alguna d'aquestes línies. Les línies de recerca no han de coincidir necessàriament amb un subgrup de recerca de l'IQC.
- Estimular que les línies de recerca de l'IQC tinguin un caire eminentment "pràctic" i comptin amb la col·laboració de grups de recerca experimentals i/o empreses.
- A nivell de la UdG, defensar que una producció científica de més qualitat ha de repercutir en la reducció de tasques docents.
- Mantenir el nombre de seminaris interns en anglès en un cada quinze dies.
- Mantenir el programa actual d'organització de congressos, i això implica l'organització de com a mínim un congrés internacional cada dos anys.
- Afavorir les relacions dels membres de l'IQC amb la comunitat científica

internacional (assistència a congressos, invitacions a l'IQC, visites a laboratoris estrangers...) amb l'objectiu d'arribar a un mínim d'assistència a dos congressos internacionals per investigador de l'IQC i any, 4 ponències invitades a investigadors de l'IQC per any, 12 visites d'investigadors estrangers a l'IQC per any i 10 visites d'investigadors de l'IQC a laboratoris estrangers per any.

- Mantenir l'opció que en l'actualitat tenen tots els membres de l'IQC de poder assistir a un mínim d'un congrés/workshop internacional (o curs d'estiu o equivalent) que es faci en qualsevol part d'Europa cada any.
- Incentivar l'arribada d'investigadors d'altres àmbits de coneixement (enginyers, físics, matemàtics, etc…). Les peticions de contracte d'investigadors o d'estades d'investigadors iguals o superiors a 6 mesos hauran de ser aprovades per la Comissió de Govern de l'IQC.
- Donar el màxim de facilitats per tal que els doctors formats a l'IQC que ho vulguin es puguin reincorporar a l'Institut després de fer un post-doc a l'estranger. Incorporar un mínim de dos post-docs o investigadors sèniors en forma de JdLC, RyC o ICREA en els propers 3 anys.
- Incrementar els outputs de l'Institut fins arribar a publicar cada any 40 articles en revistes científiques indexades, 5 participacions en llibres (ja sigui en forma d'autor, d'autor de capítols, o d'editor), 5 articles de divulgació i 2 Tesis doctorals..

5. Indicadors d'assoliment d'objectius

Creiem que el seguiment del grau d'assoliment dels objectius que ens proposem en aquest pla estratègic es pot fer analitzant els següents indicadors:

- Número total d'articles ISI per any: 35, 37 i 40 pels anys 2005, 2006 i 2007.
- Percentatge d'articles a revistes del primer quartil: 80% o superior.
- Percentatge d'articles a revistes "top ten" (JACS, Angew. Chem. Chem. Eur. J., Acc. Chem. Res., Chem. Rev.,...): 15% o superior.
- Número de highly-cited-papers: 1 cada any.
- Número de Tesis doctorals defensades: 1, 2 i 2 pels anys 2005, 2006 i 2007.
- Número de contractats JdlC, RyC o ICREA: 2 nous contractes fins al 2007.

- Incrementar els convenis amb empreses en els propers 3 anys.

Girona, febrer de 2005
Consell d'Institut

ANNEX 1. NOVA ESTRUCTURA ORGANITZATIVA.
GRUP DE RECERCA "QUIMICA TEÒRICA I MODELATGE MOLECULAR"



INSTITUT DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

ESTRUCTURA DE PERSONAL ACADÈMIC

QtMm

7+5+9

EMQ

2+0+2

- RAMON CARBÓ-DORCA (CU)
- EMILI BESALÚ (TU)
- JOAQUIM CHAVES (A2.6)
- JUANMA BARROSO (A2.6)
- JAVIER SÁNCHEZ-MONGE (3ERC)

PIM

1+3+2

- MIQUEL DURAN (CU)
- SERGEI VYBOISHCHIKOV (RYC)
- PEDRO SALVADOR (A3.TC)
- MIQUEL TORRENT (POSTDOC)
- EDUARD MATITO (BFU)
- SAMAT TUSSUPBAYEV (BFI)

RQC

2+1+2

- MIQUEL SOLÀ (CU)
- SÍLVIA SIMON (TU)
- JOSEP M. LUIS (LECTOR)
- MIREIA GÜELL (BFI)
- OSCAR JIMÉNEZ HALLA (BFI)
- JOSEP MORERA (3ERC)

FTC

2+1+3

- ALEXANDER VOYTIUK (ICREA)
- LLUÍS BLANCAFORT (RYC)
- JOAN MIRÓ (TU)
- ALBERT POATER (BFU)
- DAVID HUGAS (BFPI)
- DAVID ASTURIOL (BUDG)

Magnitud dels grups: x + y + z
x: Funcionaris i investigadors ICREA
y: Drs. contractats a temps complet
z: Becaris o prof. contractats predoctorals

QtMm: Grup de recerca en Química Teòrica i Metodología Mecanoquàntica
EMQ: Subgrup de Recerca en Enginyeria Molecular Quàntica
PIM: Subgrup de recerca de Propietats i Interaccions Moleculars
RQC: Subgrup de recerca en Reactivitat Química i Catàlisi
FEM: Subgrup de recerca en Fotoquímica i Transferencia de Càrrega

CU: Catedràtic de Universitat
ICREA: Investigador contractat per l'ICREA
TU: Professor Titular de Universitat
LECTOR: Professor Lector
A3.TC: Professor Associat a temps complet, nivell 3 Doctor
RyC: Contractat del programa Ramon y Cajal
BFI: Becari de la Generalitat de Catalunya
BFU: Becari del MECD
BFPI: Becari del MCyT
BUdG: Becari de la Universitat de Girona
3erC: Estudiant de tercer cicle

ANNEX 2. LINIES DE RECERCA DE L'INSTITUT DE QUÍMICA COMPUTACIONAL

GRUP DE RECERCA "QUIMICA TEÒRICA I MODELATGE MOLECULAR"

LÍNIA 1. Enginyeria Molecular Quàntica

L11. Fonaments matemàtics de la química quàntica.
Teoria de perturbacions, teoria variacional, Teoria de mesures de semblança sobre funcions de densitat, algoritmes, anàlisis estadístics, espais mètrics,...

L12. Aplicacions de la semblança molecular a problemes químics i farmacològics.
Anàlisi de densitats electròniques a partir de mesures de semblança, predicció de les propietats moleculars...

L13. Estudis i desenvolupament de les metodologies QSAR i QSPR.
Índexs topològics, descriptors, correlacions QSAR i QSPR, data mining, Models QSAR lineals i no-lineals, proves de randomització, estudis de validació creuada, avaluació probabilística …

LÍNIA 2. Propietats i interaccions moleculars

L21. Estructura Molecular.
Càlcul de distàncies i angles d'enllaç, estudi de la naturalesa de l'enllaç químic, estructura de ful·lerens, estructura de sistemes organometàl·lics i bioinorgànics, anàlisis d'aromaticitat...

L22. Interaccions moleculars febles.
BSSE, interaccions de van der Waals, interaccions per pont d'hidrogen, estudi de clústers, interaccions agòstiques, enllaços dihidrogen, efectes de cooperativitat...

L23. Propietats elèctriques i òptiques no lineals.
Càlcul de propietats elèctriques i òptiques no lineals, efectes de la correlació electrònica en el càlcul d'aquestes propietats, desenvolupament de metodologia per millorar les tècniques de càlcul, VSCF...

L24. Espectroscopia Molecular.
Simulació d'espectres microones, IR, UV, NMR, acoblaments spin-spin, acoblaments magnètics, espectroscopia fotoelectròlica, efectes anharmònics, factors de Frank-Condon…

LÍNIA 3. Reactivitat química i catàlisi

L31. Reactivitat en química orgànica.
Reactivitat dels ful·lerens, reaccions de cicloaddició, reaccions

radicalàries, fragmentacions de biomolècules, S_N2, efectes de l'entorn...

L32. Reactivitat Organometàl·lica i Catàlisi.
Reactivitat de sistemes organometàl·lics, reactivitat dels sistemes bioinorgànics, activació d'enllaços, càlculs QM/MM i càlculs ONIOM en sistemes organometàl·lics...

L33. Catàlisi enzimàtica i processos bioquímics.
Mecanismes de reaccions catalitzades per enzims, mecanismes de funcionament cel·lular...

L34. Dinàmica Molecular.
Dinàmica Carr-Parrinello, dinàmica molecular clàssica, dinàmica Molecular Mechanics – Valence Bond (MMVB)...

LÍNIA 4. Fotoquímica i transferència de càrrega

L41 Reactivitat fotoquímica, fotofísica i processos no adiabàtics.
Superfícies d'energia potencial per a estats excitats i transferència d'electrons no adiabàtica, fotoquímica i fotofísica de les bases de l'ADN, anàlisi topològica d'interseccions còniques entre dos i tres estats, dinàmica semiclàssica non-Born-Oppenheimer, interruptors fotocròmics

L42 Transferència electrònica al DNA i macromolècules
Transferència de forats de càrrega i electrons en excés, nanoelectrònica, càlcul de paràmetres que controlen la transferència de càrrega

LÍNIA 5. Metodologia mecanoquàntica

L51. Matrius de densitat reduïdes.
Densitats CHA, càlculs AIM, càlculs ELF, ordres d'enllaç, àtoms "fuzzy", forats de Fermi, forats de correlació-bescanvi, estudi de la localització/deslocalització electrònica, fluctuació electrònica, aromaticitat, densitats intra i extraculars, teoria del funcional de la densitat, teoria del funcional de la densitat conceptual,...

L52. Química Quàntica
Mètodes de descomposició de l'energia, funcions flotants i funcions d'enllaç, Mètodes de correcció del BSSE, Mètode CP, mètode CHA, correccions en sistemes carregats, correccions en sistemes periòdics...

L53. Desenvolupament de mètodes semiempírics
Mètodes semiempírics per a l'estat fonamental i estats excitats

LÍNIA 6. Altres

L61. Divulgació.
L62. Llibres de docència.
L63. Altres.