

Institut Català d'Investigació Química

1. Descripció del centre de recerca

L'[Institut Català d'Investigació Química](#) (ICIQ) és un centre d'excel·lència en recerca química situat a Tarragona i compta amb més de 300 professionals, distribuïts en 19 grups de recerca que desenvolupen projectes científics d'avantguarda combinant metodologies experimentals i computacionals.

L'ICIQ és una fundació del sector públic que forma part de la xarxa de centres CERCA de la Generalitat de Catalunya, i és membre fundador del BIST. per la seva excel·lència i impacte en el sistema de recerca.

L'ICIQ afronta grans reptes globals com l'emergència climàtica, la transició energètica i la salut de les persones. Des del 2014, ha estat distingit amb tres acreditacions d'excel·lència Severo Ochoa, consolidant-se com a centre de referència en catàlisi sostenible, energies renovables i medicina molecular.

- Adreça:

Institut Català d'Investigació Química (ICIQ)
Av. Països Catalans, 16
43007 Tarragona, Spain

2. Descripció del projecte

En el cas de l'ICIQ s'ofereixen 2 projectes diferents, en els següents grups de recerca:

a) [Supramolecular structures for applications in molecular sensing, catalysis and transport](#)

- **Group leader:** Prof. Pau Ballester
- **Mentor:** Dra. Gemma Aragay
- **Summary of the project:** El grup del Prof. Pau Ballester investiga en el camp de la química supramolecular, especialment en la síntesi i estudi de receptors moleculars capaços d'interaccionar amb altres molècules a través d'enllaços no covalents. Aquesta àrea té aplicacions potencials en camps com la catàlisi, la detecció molecular i el reconeixement selectiu.

Durant l'estada, l'estudiant col·laborarà en un projecte centrat en el càlcul teòric d'espectres de RMN i UV-Vis, comparant els resultats amb dades experimentals. Aquesta tasca permetrà entendre millor la interacció entre la teoria computacional i la química experimental. En funció de la seva motivació i capacitats, es podrien assignar tasques addicionals relacionades amb la modelització de sistemes supramoleculars.

b) Computational modeling of chemical reactivity

- o **Group leader:** Prof. Carles Bo
- o **Mentor:** Dr. Jordi Buils
- o **Summary of the project:** El grup del Prof. Carles Bo treballa en el desenvolupament i aplicació de mètodes computacionals per entendre mecanismes de reacció, estructures moleculars complexes i interaccions entre molècules i superfícies.
El projecte ofert se centrarà en l'ús de la química computacional per estudiar sistemes químics d'interès en catàlisi i disseny molecular. L'estudiant aprendrà a utilitzar programes de química quàntica, analitzar superfícies d'energia potencial i interpretar resultats teòrics per complementar estudis experimentals desenvolupats al centre.

3. Perfil específic

Estudiant de 3r o 4t curs de grau en Química, Enginyeria Química, Física, o dobles graus amb formació científica sòlida. Es valorarà positivament tenir coneixements previs de química computacional, espectroscòpia o química supramolecular, així com experiència amb eines de simulació o càlcul. També es valorarà l'interès per la recerca, la capacitat d'anàlisi, el pensament crític i les ganes d'aprendre en un entorn científic internacional.

Es requereix un nivell bàsic d'anglès per poder seguir discussions científiques i llegir literatura especialitzada.