



Annex 1. Model de bases de la convocatòria

BASES DE LA CONVOCATÒRIA DE 01 CONTRACTES DE PERSONAL INVESTIGADOR PREDOCTORAL EN FORMACIÓ AMB FINANÇAMENT DEL PROJECTE O CONTRACTE DE Modelització Computacional de Materials Interruptor) amb el codi (PID2020-115165GB-I00) finançat pel MCIUN - Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades

Base I. Objecte

1. Aquestes bases determinen les condicions i el procediment de contractació de 01 contractes de personal investigador predoctoral en formació, les característiques dels quals s'especifiquen a l'**annex 1** d'aquesta resolució.
2. Els aspirants seleccionats subscriuen un contracte de personal investigador predoctoral en formació, amb dedicació a temps complet, i vinculat al projecte o contracte de recerca específic pel qual es concedeix, les característiques del qual s'especifiquen a l'annex 1.

Base II. Requisits de les persones aspirants

1. Els requisits que han de complir els aspirants en la data de finalització del termini de presentació de les sol·licituds, i que han de continuar complint durant tot el contracte, són:
 - a) Estar en possessió del títol de llicenciat, enginyer, arquitecte o graduat universitari d'almenys 300 crèdits ECTS (European Credit Transfer System) o màster universitari, o l'equivalent.
 - b) No estar en possessió del títol de doctor, ni haver defensat la tesi doctoral.
 - c) Ser admès en un programa de doctorat, a temps complet, de la Universitat de Barcelona.
 - d) Disposar del permís de treball i de residència abans de formalitzar el contracte corresponent, i mantenir-los vigents durant tota la relació laboral, en el cas de les persones estrangeres no comunitàries i de les que no puguin ser incloses en l'àmbit d'aplicació dels tractats internacionals celebrats per la Unió Europea i ratificats per Espanya.
 - e) No haver estat contractat mitjançant aquesta modalitat de contracte predoctoral, ni a la mateixa entitat ni en cap altra, per un temps superior a quatre anys, incloses les possibles pròrrogues, excepte en el cas de persones amb discapacitat, per a les quals el temps no pot ser superior a sis anys. En cas que prèviament s'hagi gaudit d'un contracte predoctoral per un temps inferior a quatre anys (o sis en cas de discapacitat), la persona beneficiària pot ser contractada pel temps que manqui fins a arribar a la



durada màxima prevista en la convocatòria. Si la durada resultant és inferior a la prevista pel contracte ofert, no es pot concertar el contracte adjudicat, o bé es pot oferir un contracte pel temps de contracte resultant, sempre que això no perjudiqui el projecte.

Base III. Presentació de les sol·licituds: termini i documentació

1. El termini per presentar la sol·licitud i la resta de documentació requerida és el següent: del 15 al 31 de/d' Maig de 2023, ambdós inclosos.
2. Les sol·licituds per participar en la convocatòria s'han de formalitzar d'acord amb el model normalitzat que s'adjunta a l'**annex 2**, en què l'aspirant ha de fer constar les dades que es requereixen i una adreça de correu electrònic per enviar-li les notificacions electròniques escaients (amb la mateixa finalitat pot indicar el seu número de telèfon mòbil).

Adicionalment, cal adjuntar a la sol·licitud i declaració responsable el currículum i una còpia dels expedients acadèmics.

En qualsevol moment, la Universitat pot requerir a qualsevol aspirant l'aportació de la documentació acreditativa dels aspectes declarats responsablement.

3. La sol·licitud inclou una declaració responsable per la qual, d'acord amb el que disposa l'article 69 de la Llei 39/2015, d'1 d'octubre, del procediment administratiu comú de les administracions públiques, declara, sota la seva responsabilitat, que reuneix els requisits per participar en aquest procés selectiu d'acord amb la base II, i que són certes totes i cadascuna de les dades consignades en la sol·licitud i en la documentació que aporta annexa: currículum i còpia dels expedients acadèmics de grau i màster.

En el cas d'estudis cursats a l'estranger, cal adjuntar l'equivalència de les notes mitjanes d'acord amb l'escala de qualificació de les universitats espanyoles, i seguint el *Procedimiento para aplicar las escalas y tablas de equivalencia de notas medias de estudios y títulos universitarios extranjeros* (Resolució de 21 de març de 2016 i de 21 de juliol de 2016 de la Direcció General de Política Universitària del Ministeri de Ciència i Innovació, i actualització de la Secretaria General d'Universitats de 18 de setembre de 2017).

Així mateix es compromet a presentar, abans de la signatura del contracte, els documents acreditatius del compliment dels requisits.

En cas d'incompliment de l'expressat a la sol·licitud o a la declaració responsable o que no s'aporti la documentació requerida en el termini



establert, el contracte s'adjudica a l'aspirant següent de la llista d'espera, si escau.

4. La sol·licitud i declaració responsable, acompanyada de la resta de documentació requerida, s'ha de presentar, en el termini disposat a la base III.1, al registre de la Universitat de Barcelona, mitjançant el procediment d'instància genèrica disponible a <https://www.ub.edu/eadministracio/IG.html>.
5. Un cop emplenats els camps disponibles a l'aplicació de la instància genèrica, cal adjuntar-hi la sol·licitud d'acord amb el model establert a l'annex 2, que inclou la declaració responsable, degudament emplenada i firmada electrònicament. Igualment, s'ha d'adjuntar la resta de documentació requerida.
6. Per a la firma de la sol·licitud i declaració responsable, es pot utilitzar qualsevol sistema de firma electrònica avançada o reconeguda, d'acord amb l'establert per la Normativa reguladora de la política d'identificació i signatura de la UB, aprovada pel Consell de Govern de la UB de 14 de febrer de 2018 i modificada el 27 de febrer de 2020.¹ A tal efecte, es pot consultar <http://www.ub.edu/certificatdigital/ca/index.html>, on, entre d'altres, es pot trobar l'aplicació SignaSuite UB, que permet firmar electrònicament mitjançant la targeta universitària intel·ligent (TUI o carnet de la UB): <https://www.ub.edu/signasuiteUB/web/signador.php>.
7. La presentació de la sol·licitud suposa l'acceptació incondicional d'aquestes bases.

Base IV. Llista de persones admeses i excloses

1. Finalitzat el termini d'admissió de sol·licituds, el degà o degana emet la resolució per la qual declara i fa pública, d'acord amb la base IV.3, la relació provisional de persones admeses i excloses, amb indicació de les causes d'exclusió i requeriment de la documentació no presentada.

En cas que no consti cap aspirant exclòs o que l'exclusió ho sigui per causa no esmenable, es dicta directament la relació definitiva de persones aspirants admeses i excloses.

2. Amb la publicació de la relació provisional, s'atorga un termini de 10 dies hàbils, a comptar de l'endemà de la publicació, per tal que els aspirants puguin esmenar la documentació presentada de forma defectuosa i les causes d'exclusió. Es considera que les persones que no esmenen la causa

1

https://www.ub.edu/web/ub/galeries/documents/sites/transparencia/organs_govern/consell_gov_ern/Acords/consell_20200227/11.4Politica_signatura_i_firma_modificacio_v17022020.pdf



d'exclusió en el termini indicat desisteixen de continuar el procediment, i són declarades excloses amb caràcter definitiu.

3. A partir de la finalització del termini anterior, el degà o degana (o director o directora de l'institut de recerca), actuant per delegació del rector o rectora, emet la resolució en què declara la llista definitiva de persones admeses i excloses, que es fa pública de la manera establerta anteriorment.
4. Contra aquesta resolució que esgota la via administrativa, independentment de la seva immediata executivitat, les persones interessades poden interposar recurs davant la jurisdicció contenciosa administrativa en el termini de dos mesos, a comptar de l'endemà de la publicació de la resolució. No obstant això, contra aquesta resolució poden optar per interposar un recurs de reposició, en el termini d'un mes, a comptar de l'endemà de la publicació de la resolució, davant el mateix òrgan que l'ha dictada que resoldrà per delegació del rector. En aquest cas no es podrà interposar el recurs contenciós administratiu mentre no es dicti resolució expressa o presumpta del recurs de reposició.

Base V. Avaluació i selecció

1. Les sol·licituds les valora una comissió formada pels membres indicats a l'**annex 1**.
2. La comissió específica ha d'avaluar les sol·licituds d'acord amb els criteris següents:
 - Nota mitjana de l'expedient acadèmic dels estudis de grau i màster (o de 1r i 2n cicle): fins a 5 punts d'un total de 10.
 - Mèrits curriculars: fins a 1 punt d'un total de 10 d'acord amb els criteris específics relacionats a l'annex 1.
 - Adequació a les tasques que cal desenvolupar en el marc del projecte o ajut a la recerca a què es quedaria vinculat: fins a 4 punts d'un total de 10.
3. La comissió específica acorda la proposta d'adjudicació i la llista prioritzada d'aspirants que han assolit un total de com a mínim 5 punts, o declara deserta la convocatòria en cas que ningú no hagi assolit aquesta puntuació mínima.

S'ha de fer constar en acta la motivació corresponent a cada criteri.

4. La proposta d'adjudicació es publica a la seu electrònica de la UB, sens perjudici que se'n pugui fer difusió addicional al web del centre, i ha de contenir la puntuació total dels aspirants que hagin assolit un total de com a mínim 5 punts.



En la publicació de la proposta d'adjudicació s'ha de fer constar el règim de recursos disponible d'acord amb la base XV de la convocatòria.

Totes les publicacions s'han de fer amb nom i cognoms dels aspirants.

Base VI. Tramitació de la documentació per signar els contractes

1. La comissió específica avaluadora corresponent tramet la documentació relativa a la persona seleccionada (actes del concurs, i sol·licitud i documentació presentada), a més del justificant que acrediti la reserva de crèdit corresponent emès per l'òrgan gestor de la despesa per finançar el cost complet del contracte, inclosa la quota patronal a l'oficina d'affers generals del centre convocant per tal que es formalitzi el contracte corresponent.
2. L'oficina d'affers generals envia les còpies del contracte i de la resta de documentació, d'acord amb les instruccions de contractació de PDI, juntament amb tota la documentació tramesa per la comissió específica, a la unitat de Personal Acadèmic de la UB perquè en gestioni la nòmina i l'alta a la Seguretat Social.
3. Finalment, la unitat de Personal Acadèmic de la UB tramet una còpia del contracte al Vicerectorat de Doctorat i Promoció de la Recerca.

Base VII. Formalització dels contractes

1. La persona adjudicatària disposa de 15 dies hàbils, a comptar de la data de publicació de la proposta d'adjudicació a la seu electrònica de la UB, per signar el contracte, prèvia acreditació de la documentació acreditativa del compliment dels requisits (aquest termini de 15 dies només es podria ampliar per causa de força major).
2. En cas que, per causes imputables a la persona interessada, el contracte no se signi en el termini indicat, s'entén que hi renuncia, i la comissió específica pot adjudicar el contracte a l'aspirant següent de la llista prioritzada.

Base VIII. Col·laboració docent

L'investigador predoctoral pot col·laborar en tasques docents. La col·laboració ha de ser d'un mínim de 120 hores i un màxim de 180, durant l'extensió total del seu contracte predoctoral. En cap cas es poden superar les 60 hores anuals.

L'assignació de la docència té caràcter formatiu i correspon a la direcció del departament al qual pertanyi el director o directora de la tesi, al qual s'ha d'haver



escollat; en tot cas, s'ha de desenvolupar de conformitat amb la normativa d'aplicació vigent (en aquest moment, la Normativa reguladora de la col·laboració docent que pot impartir el personal amb contracte laboral d'investigador predoctoral en formació de la Universitat de Barcelona, aprovada pel Consell de Govern de data 27 de febrer de 2020).²

Base IX. Durada i pròrrogues

1. La durada del contracte és de 1 any.
El contracte es pot prorrogar per períodes de com a mínim un any, sempre que hi hagi dotació econòmica que el financi i que la durada del projecte ho permeti.
2. Arribada la finalització del contracte d'acord amb la durada màxima prevista en aquesta convocatòria, el doctorand no pot desenvolupar cap tipus d'activitat docent ni relacionada amb el grup de recerca en el qual hagi desenvolupat el seu contracte de treball. Pot continuar amb les activitats relacionades exclusivament amb el desenvolupament de la tesi doctoral, que no impliquen activitat laboral de cap tipus, i sempre que continuï matriculat en el programa de doctorat.

Base X. Suspensió de la durada del contracte

1. Les situacions d'incapacitat temporal, risc durant l'embaràs, maternitat, paternitat, adopció, guarda amb finalitat d'adopció o acolliment i risc durant la lactància natural suspenen el còmput de la durada del contracte, d'acord amb el que estableixen l'article 21 de la Llei de la ciència i l'article 6.2 del Reial decret 103/2009.
2. També suspenen el còmput de la durada del contracte les situacions previstes a l'article 45.1n del text refós de la Llei de l'Estatut dels treballadors, com a mesura de protecció de les dones víctimes de violència de gènere. En tot cas, cal acreditar aquestes situacions.
3. El contracte també se suspèn, durant un màxim de 4 mesos, en el cas de reclamació per incompliment de les tasques del director o directora de la tesi doctoral, en les condicions establertes a l'article 6 del Reial decret 103/2019.

2

https://www.ub.edu/web/ub/galeries/documents/sites/transparencia/organs_govern/consell_gov/ern/Acords/consell_20200227/7.4_Proposta_Normativa_collaboracio_docent_predoctorals.pdf



Base XI. Retribucions

1. L'import íntegre mensual que han de percebre els beneficiaris dels contractes és el que s'especifica a l'annex, determinat segons les regles següents:

La retribució bruta del contracte, per 14 pagues, és la següent :

- Primer i segon any de contracte: 23.398,72 €
- Tercer any de contracte: 24.819,19 €
- Quart any de contracte: 30.569,27 €

En cas que l'investigador predoctoral hagi gaudit d'un contracte en una altra institució sense completar-ne la durada màxima, cal estar a les retribucions que corresponguin d'acord amb el que estableix l'article 7 del Reial decret 103/2019, tenint en compte el període gaudit en l'altra institució.

2. A aquests imports s'apliquen les retencions corresponents, d'acord amb la normativa vigent. El pagament és per mesos vençuts i s'efectua directament a la persona beneficiària, un cop formalitzat el contracte. Els mesos de juny i desembre la mensualitat és doble.

Base XII. Drets i obligacions del personal investigador predoctoral en formació i altres aspectes del contracte predoctoral

1. Els investigadors han de respectar els principis del Codi europeu de conducta per a la integritat en la recerca, recollits a l'article 11 del Reial decret 103/2019, i tenen els drets i deures reconeguts en la legislació vigent, en la normativa interna de la UB i, en especial, en els articles 12 i 13 del Reial decret 103/2019, en el contracte subscrit i en el previst en aquesta convocatòria.
2. Els investigadors predoctorals, a més de les obligacions previstes en la normativa indicada a l'apartat 1 d'aquesta base, també tenen les obligacions següents:
 - a) Incorporar-se a les activitats del projecte en les condicions establertes.
 - b) Seguir els estudis de doctorat mitjançant la formalització de la matrícula de doctorat cada curs acadèmic, i complir els objectius del pla de recerca presentat.
 - c) Complir el programa de col·laboració docent establert.
 - d) Presentar els informes anuals per tramitar el seguiment o la pròrroga del contracte predoctoral d'acord amb aquestes bases i amb la normativa d'aplicació.



- e) Mantenir vigents els permisos de residència i de treball corresponents, en el cas de ser persones no comunitàries.
- f) Comunicar la previsió de defensa de la tesi doctoral tan aviat com en tinguin coneixement.

La persona contractada ha de complir els terminis de presentació del dipòsit de la tesi doctoral i de pròrrogues que corresponguin, tenint en compte la normativa vigent aplicable. Cal tenir en compte que, si la tesi s'ha iniciat abans de la data del contracte, els terminis de presentació del dipòsit de la tesi no es veuen alterats pel contracte predoctoral.

- 3. La jornada laboral, els descansos, les vacances, els permisos i la resta de condicions de treball són les establertes per al personal investigador en formació en el Conveni col·lectiu del personal docent i investigador de les universitats públiques catalanes, i en la resta de normativa que sigui d'aplicació.

Base XIII. Incompatibilitats

- 1. La formalització del contracte predoctoral amb la Universitat de Barcelona és incompatible amb altres beques o ajuts per a personal investigador en formació o equivalent que tinguin la mateixa finalitat.
- 2. S'aplica el règim d'incompatibilitats previst a la Llei 21/1987, de 26 de novembre, d'incompatibilitats del personal al servei de l'Administració de la Generalitat, així com a la Llei 53/1984, de 26 de desembre.

Base XIV. Extinció

- 1. El contracte predoctoral s'extingeix per l'arribada del termini previst en el contracte, o per la resta de causes previstes en aquestes bases, en la normativa i la legislació d'aplicació als contractes predoctorals, i en l'Estatut dels treballadors.

En cas que el contracte finalitzi per denúncia, la part que formula la denúncia ha de notificar a l'altra la finalització del contracte amb una antelació mínima de 15 dies.

- 2. L'obtenció del títol de doctor extingeix el contracte predoctoral, malgrat que no s'hagi esgotat la durada màxima del contracte.
- 3. El títol de doctor es considera obtingut el dia de l'acte de defensa i aprovació de la tesi doctoral, i a tal efecte els investigadors predoctorals en formació



tenen l'obligació de notificar la data prevista de defensa de la tesi tan aviat com en tinguin coneixement. Així s'ha de fer constar en el contracte subscrit.

4. També és causa de finalització de contracte la no formalització de la matrícula en el programa de doctorat en els períodes habilitats per la Universitat.
5. Així mateix, és causa d'extinció del contracte l'informe desfavorable emès per la comissió acadèmica del programa de doctorat, amb caràcter anual.

Base XV. Recursos

1. Contra les resolucions dictades pel degà o degana per delegació del rector o rectora que esgoten la via administrativa, independentment de la seva immediata executivitat, les persones interessades poden interposar recurs contenciós administratiu davant del Jutjat Contenciós Administratiu de Barcelona en el termini de dos mesos, a comptar de l'endemà de la publicació de la resolució, d'acord amb els articles 8 i 46 de la Llei 29/1998, de 13 de juliol, reguladora de la jurisdicció contenciosa administrativa.

Això no obstant, les persones interessades poden optar per interposar un recurs de reposició davant el mateix òrgan que l'ha dictada, en el termini d'un mes, a comptar de l'endemà de la publicació de la resolució. En aquest cas no es podrà presentar el recurs contenciós administratiu mentre no es dicti resolució expressa o es produeixi la desestimació presumpta del recurs de reposició, de conformitat amb l'article 123 i següents de la Llei 39/2015, d'1 d'octubre, del procediment administratiu comú de les administracions públiques.

2. Contra la proposta d'adjudicació del contracte predoctoral dictada per la comissió específica avaluadora corresponent, independentment de la seva immediata executivitat atès que no esgota la via administrativa, les persones interessades poden interposar recurs d'alçada davant el rector de la Universitat de Barcelona en el termini d'un mes a comptar de l'endemà de la publicació de la resolució a la seu electrònica de la UB, segons el que estableixen els articles 121 i 122 de la Llei 39/2015, d'1 d'octubre, de procediment administratiu comú de les administracions públiques.

Igualment, les persones interessades legítimes poden interposar qualsevol altre recurs que considerin convenient per a la defensa dels seus interessos.

Base XVI. Terminis del procediment



1. El mes d'agost és inhàbil a tots els efectes relacionats amb aquest procediment, inclosa la resolució de reclamacions en via administrativa
2. El termini màxim per resoldre la convocatòria és de sis mesos, a comptar de la publicació de la convocatòria a la seu electrònica, transcorreguts els quals es consideren desestimades totes les sol·licituds.

Base XVII. Dret d'informació relatiu al tractament de dades personals

1. El responsable del tractament de les dades personals és la Secretaria General de la Universitat de Barcelona, amb adreça postal a la Gran Via de les Corts Catalanes, 585, 08007 Barcelona i adreça de correu electrònic secretaria.general@ub.edu.
2. La finalitat del tractament de les dades personals és la de gestionar els contractes de personal investigador predoctorals en formació convocats per la UB.
3. La base jurídica és el compliment d'una missió duta a terme en interès públic (Llei 1/2003, de 19 de febrer, d'universitats de Catalunya; Llei orgànica 6/2001, de 21 de desembre, d'universitats, i Llei 38/2003, de 17 de novembre, general de subvencions). El consentiment explícit és necessari per al tractament de categories especials de dades personals.
4. Les dades personals es conserven durant el temps necessari per complir la finalitat per la qual es recullen i per determinar les possibles responsabilitats que se'n poguessin derivar.
5. La destinatària de les dades és la Universitat i, si n'hi ha, els encarregats del tractament. En el cas que es resulti seleccionat per a la contractació com a personal investigador predoctoral, també són persones destinatàries de les dades necessàries les administracions tributàries i la Tresoreria General de la Seguretat Social. Així mateix, es publica la resolució de la convocatòria al lloc web de la UB indicat en les presents bases. No es preveu cap altra cessió de dades, tret que sigui per obligació legal. En aquest supòsit, únicament s'envien les dades necessàries.
6. Es pot accedir a les dades personals, sol·licitar-ne la rectificació, la supressió, l'oposició o la limitació, mitjançant un escrit adreçat a la Secretaria General de la Universitat de Barcelona per correu postal (Gran Via de les Corts Catalanes, 585, 08007 Barcelona) o per correu electrònic (secretaria.general@ub.edu). Cal adjuntar-hi una fotocòpia del DNI o d'un altre document identificador vàlid.
7. Qui consideri que els seus drets no s'han atès adequadament pot comunicar-ho al delegat de protecció de dades de la UB per correu postal (travessera de



les Corts, 131-159, Pavelló Rosa, 08028 Barcelona) o per correu electrònic (protecciodades@ub.edu). També té dret a presentar una reclamació davant l'Autoritat Catalana de Protecció de Dades.

Barcelona,

Dr. Miquel Joan Vidal Espinar
Degà de la Facultat de Química
per delegació del Rector

Contra les resolucions dictades pel degà o degana per delegació del rector o rectora que esgoten la via administrativa, independentment de la seva immediata executivitat, les persones interessades poden interposar recurs contenciós administratiu davant del Jutjat Contenciós Administratiu de Barcelona en el termini de dos mesos, a comptar de l'endemà de la publicació de la resolució, d'acord amb els articles 8 i 46 de la Llei 29/1998, de 13 de juliol, reguladora de la jurisdicció contenciosa administrativa.

Això no obstant, les persones interessades poden optar per interposar un recurs de reposició davant el mateix òrgan que l'ha dictada, en el termini d'un mes, a comptar de l'endemà de la publicació de la resolució. En aquest cas no es podrà interposar el recurs contenciós administratiu mentre no es dicti resolució expressa o es produeixi la desestimació presumpta del recurs de reposició, de conformitat amb l'article 123 i següents de la Llei 39/2015, d'1 d'octubre, del procediment administratiu comú de les administracions públiques.



ANNEX 1

1. NOMBRE DE CONTRACTES CONVOCATS: 1

2. PROJECTE DE RECERCA:

- La persona adjudicatària s'incorporarà al projecte Modelització Computacional de Materials Interruptor
- Responsable del projecte: Jordi Cirera Fernandez
- L'investigador predoctoral en formació quedarà adscrit al Departament de departament de Química Física i Ciència de Materials (Secció de Química Física)
- Finançament a càrrec dels fons transferits a les partides

3. DOTACIÓ ECONÒMICA:

Les despeses són a càrrec del projecte o contracte de recerca PID2020-115165GB-I00, fins a un total de **23.398,72 euros**.

4. COMISSIÓ DE VALORACIÓ:

- President o presidenta: Dr. Eliseo Ruiz Sabin
- Vocal: Dr. Jordi Cirera Fernandez
- Secretari o secretària: Josep Maria del Amo Bonilla

5. MÈRITS ESPECÍFICS PER VALORAR EN L'ADJUDICACIÓ:

- Màster, o estar finalitzant el màster en química computacional o similar
- Formació en química de coordinació
- Experiència en l'ús de programari d'estructura electrònica (ORCA, Gaussian, SIESTA, ...)
- Experiència en programació amb llenguatges Python i Fortran, així com encriptació bash.
- Experiència en l'ús de grans equips de càlcul
- Estar inscrit en el programa de doctora de Química Teòrica i Modelització Computacional

6. CARACTERÍSTIQUES DEL CONTRACTE

- Durada total prevista: 4 anys
- Durada del contracte inicial (mínim 1 any): 1 any
- Durada de les possibles pròrrogues (mínim 1 any): 3 anys



Retribucions:

- Primera anualitat: 23.398,72 €
- Segona anualitat: 23.398,72 €
- Tercer anualitat: 24.819,19 €
- Quarta anualitat: 30.569,27 €

Tasques que s'han de dur a terme:

- Anàlisi sistemàtic de l'estructura electrònica de compostos de coordinació amb lantànids. A partir de models que cobreixin diferents nombres de coordinació, geometries i tipus d'àtom donador, es farà un estudi exhaustiu del desdoblament dels orbitals f per complexos amb metalls del bloc f
- Extracció de paràmetres de camp de lligand per complexos del bloc f emprant la metodologia Ab Initio Ligand Field Theory (AILFT) sobre càlculs NEVPT2. Amb aquests paràmetres es modelitzarà la luminiscència d'aquests compostos dintre del marc de la teoria Judd-Ofelt
- Calibratge de funcionals d'intercanvi/correlació per modelitzar la fotoquímica de compostos de coordinació del bloc f. A partir de dades experimentals, es buscarà una metodologia quantitativa per calcular les excitacions electròniques en aquests sistemes.
- Exploració del espai químic (chemical space) en compostos de coordinació del bloc f. A partir de la metodològica desenvolupada en el punt anterior, es faran modificacions in silico dels lligands a fi d'explorar com aquests canvis modifiquen les propietats d'efecte antena del lligand. Amb les dades obtingudes, i emprant metodologies d'aprenentatge autònom (Machine learning), es construiran models per a un disseny òptim de nous sistemes amb propietats fotoquímiques específiques.
- Construcció, amb eines d'aprenentatge autònom (Machine learning), de camps de forces per elements del bloc f a partir dels paràmetres del model del solapament angular. Amb tota l'informació generada, i emprant algorismes genètics, es buscaran els paràmetres òptims per la construcció de camps de forces basats en primers principis per compostos de coordinació del bloc f.