



INFORME FINAL DE PROYECTOS EXPLORA

Lea detenidamente las instrucciones de elaboración del informe al final de este documento.

Lea también atentamente la información solicitada en cada uno de los apartados del informe y revise la memoria técnica y el presupuesto presentados cuando hizo la solicitud de ayuda, para justificar adecuadamente todas aquellas actividades o gastos que se hayan hecho para la consecución de los objetivos que no estuvieran previstos o suficientemente detallados en la memoria y el presupuesto iniciales.

En cada apartado puede crear tantas filas como necesite.

A. Datos del proyecto

A1. Datos del proyecto	
Referencia proyecto	CTQ2013-50575-EXP
Título Proyecto	SMART CHIRAL FRAMEWORKS TO CONTROL AND INHIBIT CORROSION
Investigador Principal	JOSE LORENZO ALONSO GOMEZ
Entidad	UNIVERSIDAD DE VIGO
Centro	FACULTAD DE QUIMICA
Fecha de inicio	01/09/2014
Fecha final	31/08/2016
Duración	24 MESES
Total concedido	84.700,00€

A2. Descripción, en su caso, de las modificaciones producidas en el proyecto respecto a los datos que figuran en la resolución de concesión inicial (cambio de IP, de entidad, de centro, solicitud de prórrogas...)

B. Personal activo en el proyecto

Tiene que relacionar la situación de todo el personal de las entidades participantes que haya prestado servicio en el proyecto en el periodo que se justifica, o que no haya sido declarado anteriormente, y cuyos costes (dietas, desplazamientos, etc.) se imputen al mismo.

B.1. Equipo de investigación

Incluido en la solicitud original

	Nombre	NIF/NIE	Función en el proyecto	Fecha de baja	Observaciones
1	José Lorenzo Alonso Gómez	36124871J	Investigador Principal		
2	Xosé Ramón Nóvoa	34914531 W	Estudios corrosión		



	Rodríguez				
3	María Magdalena Cid Fernández	35553218 W	Diseño de estructuras allenicas		

No incluido en la solicitud original

	Nombre	NIF/NIE	Función en el proyecto	Fecha de alta	Fecha de baja	Observaciones
1						
2						

B.2. Equipo de Trabajo

	Nombre	NIF/NIE	Función en el proyecto	Inicio	Fin	Observaciones
1	Silvia Castro Fernández	44497846E	Síntesis y estudio de propiedades quiropticas de sistemas alenicos y espiranicos			
2	Sandra Míguez Lago	77010325 T	Síntesis y estudio de propiedades quiropticas de cajas moleculares alenicos y estudios de complejación			
3	Ani Ozcelik	Y3752636 Q	Síntesis y estudio de propiedades quiropticas de arquitecturas quirales perpendiculares a la superficie			
4	Raquel Pereira Cameselle	76997601 H	Diseño de síntesis, gestión de proyecto y mantenimiento de laboratorio			
5	Fahim Rofique	499018012	Simulaciones en dinámica molecular de pinzas moleculares quirópticas			Estancia en UVigo por colaboración en el proyecto

La solicitud de altas y bajas de nuevos investigadores en el **equipo de investigación** deben tramitarse de acuerdo con **las instrucciones de ejecución y justificación** expuesta en la página web del ministerio. La incorporación de personal que participe en el proyecto en el **equipo de trabajo** no necesita autorización por parte del ministerio, pero su actividad debe incluirse y justificarse en este informe.

C. Resumen del proyecto para difusión pública

Resuma los principales avances y logros obtenidos del proyecto con una **extensión máxima de 30 líneas**, teniendo en cuenta su posible difusión pública (páginas webs institucionales)

The development of materials presenting chiroptical responses is essential to give access to chiroptical everyday applications. In this project, chiral frameworks, molecules bearing chirality elements, were synthesized and employed for the functionalization of surfaces. Characterization of these surfaces revealed room-temperature stable self-assemble monolayer-thin up-standing chiral architectures. Stabilization of gold nanoparticles in solution as well as electric isolation of gold surfaces via surface functionalization with chiral frameworks decorated with long alkyl chains broadened the applicability of these systems. Finally, chiroptical response of a functionalized transparent substrate was proof by second harmonic generation spectroscopy, opening their use for corrosion protection and monitoring (Figures a and b).



Incorporation of chiral additives to materials may serve as corrosion reports. In this project, chiral frameworks bearing pH sensitive moieties have been synthesized and tested their chiroptical sensing capabilities upon pH modification. On the other hand, Covalent Organic Helical Cages have been designed, synthesized, and proved their utility as chiroptical sensors of organometallic sandwich compounds (Figure d). This finding opens the possibility of exploring chiroptical-redox sensing, that certainly will be of interest on the control of corrosion. Furthermore, double helical structures catch the attention of many researchers from the study of DNA to the formation of artificial architectures constituted by homochiral elements. Additionally, control over the molecular shape-persistence is the focus of many studies, taking particular attention in the choice of the building blocks. In this project, we present the synthesis of chiral frameworks bearing two and four diethynylspiranes. Theoretical simulations show that a cyclic constituted by two (P)-configured spiranic chiral axes, presents an all-carbon double helix (ACDH) structure with (M)-helicity. On the other hand, molecular dynamic simulations reveal that a larger sibling bearing four chiral moieties have a single path along its flat conformational surface, certifying it as a chiral flexible shape-persistent macrocycle (CFSPM) (Figure c). The experimentally observed stability and strong chiroptical responses of these systems along with their dynamic behavior open their exploration for the chiroptical mapping of materials.

D. Progreso y resultados del proyecto

D1. Desarrollo de los objetivos planteados

Describe los objetivos y el grado de cumplimiento de los mismos (porcentaje estimado respecto al objetivo planteado y, en su caso, indique lo que queda por realizar en cada uno de ellos)

Objetivo 1: Smart Chiral Monolayers (SCMs) for Corrosion Protection	Design and synthesis of several chiral frameworks incorporating a thiol anchoring group allowed the formation of stable up-standing chiral architectures stable at normal conditions (Figure a). The surface characterization confirmed the up-standing nature of the architectures onto the surface and second harmonic generation measurements proof the presence of chiroptical responses on the functionalized surfaces (Figure b). Finally, the electric isolation of the metal surface by the formed monolayer was confirmed, certifying this methodology as suitable for corrosion protection. Even when these systems required of great improvement prior to be released to the market, the proof presented by this project fulfills the initial expectations. (100%)
Objetivo 2: Smart Chiral pH Sensors (SCpHSs) for Corrosion Mapping	Design and synthesis of chiral cyclic systems incorporating pyridine and allenes drove to pH sensors in solution, however these allenic structures showed photo or/and thermal instability. Therefore design and synthesis of chiral systems bearing spiranic chiral building blocks was performed. The theoretical predicted strong chiroptical responses were experimentally confirmed for cycles presenting very distinct dynamic behavior, as ascertain by circular dichroism and molecular dynamic simulations. Incorporation of pH sensing functional groups into chiral frameworks is now under progress. Additionally, design and synthesis of covalent organic helical cages have been performed and used for chiroptical sensing of sandwich organometallic compounds (Figure d). Even when the pH sensing in films and corrosion tests were not performed due to the photo and thermal stability of the allenic derivatives, the development of stiff all carbon double helices and flexible shape-persistent chiroptical macrocycles satisfy the success of this part of the project due to



	their potential not only to monitor corrosion but also to map material manufacturing (Figure c). (100%)
--	---

D2. Actividades realizadas y resultados alcanzados

Describe las actividades científico-técnicas realizadas para alcanzar los objetivos planteados en el proyecto. Indique para cada actividad los miembros del equipo que han participado. **Extensión máxima 2 páginas**

Actividad 1 Design of Smart Chiral Frameworks for surface functionalization	Miembros del equipo participantes*: J.L. Alonso-Gómez
Actividad 2 : Synthesis of Smart Chiral Frameworks for surface functionalization	Miembros del equipo participantes*: A. Ozcelik, R. Pereira-Cameselle (Figure a: CF-0 , CF-2 , CF-4 and more)
Actividad 3 : Surface functionalization and characterization	Miembros del equipo participantes*: R. Novoa, A. Ozcelik, R. Pereira-Cameselle, S. Chiussi, M. Carlottic, F. Klappenberger
Actividad 4 : Chiroptical responses of Smart Chiral Monolayers	Miembros del equipo participantes*: J.L. Alonso-Gómez, A. Ozcelik, R. Pereira-Cameselle, A. Kartouzian (Figure b: CF-2)
Actividad 5 : Corrosion tests	Miembros del equipo participantes*: R. Novoa
Actividad 6: Design of Smart Chiral pH Sensors	Miembros del equipo participantes*: J.L. Alonso-Gómez, M.M. Cid, R. Pereira-Cameselle
Actividad 7: Synthesis of Smart Chiral pH Sensors	Miembros del equipo participantes*: S. Castro-Fernández, A. Ozcelik, R. Pereira-Cameselle.
Actividad 8: pH Sensitivity of Smart Chiral pH Sensors (SCpHSs) by ECD	Miembros del equipo participantes*: S. Castro-Fernández, M.M. Cid
Actividad 9: Design of Covalent Organic Helical Cages	Miembros del equipo participantes*: J.L. Alonso-Gómez, S. Míguez-Lago (Figure d, COHC)
Actividad 10: Synthesis of Covalent Organic Helical Cages	Miembros del equipo participantes*: S. Míguez-Lago, M.M. Cid (Figure d, COHC)
Actividad 11: Design of All-Carbon Double Helices and Flexible Shape-Persistent Macrocycles	Miembros del equipo participantes*: J.L. Alonso-Gómez, S. Castro-Fernández (Figure c, (P_2)-1 and (P_4)-2)
Actividad 12: Synthesis of All-Carbon Double Helices and Flexible Shape-Persistent Macrocycles	Miembros del equipo participantes*: S. Castro-Fernández (Figure c, (P_2)-1 and (P_4)-2)

Nota: En caso de incluir figuras, cítelas en el texto e insértelas en la última página

*Resalte en negrita las realizadas por el IP

D3. Problemas y cambios en el plan de trabajo

Describe las dificultades y/o problemas que hayan podido surgir durante el desarrollo del proyecto, Indique cualquier cambio que se haya producido respecto a los objetivos o el plan de trabajo inicialmente planteados, así como las soluciones propuestas para resolverlos.

- On the search for conformationally stable chiral frameworks, we found Covalent Organic Helical Cages as an appealing target, as a proof of principal we have developed a versatile synthetic methodology. Even when the initial proposal was focused of pH sensing, we found these COHCs as appropriated hosts for sandwich organometallic compounds (SOCs). Since SOC's can be easily



reduced and/or oxidized, we devote part of our effort on the search for chiroptical sensing of SOCs and found the chiroptical sensing of a ruthenium SOC. The combination of COHCs with strong chiroptical responses with SOCs that are easy to reduce and/or oxidase, opens a gate for chiroptical redox coupled sensing, a field from which the monitoring against corrosion may benefit (Figure d, **COHCs**).

- Prior to this proposal we were aware of the photoisomerization process that allenic moieties can undergo when directly attached with electron rich functional groups. Along this project, however, we found that the ring strength energy may also induce photo and/or thermal isomerization of the chiral allene. This process was sufficiently slow to prove that up-standing chiral architectures can protect a metal surface from electric current (Figure a and b), however the fast isomerization in solution of chiral frameworks devoted to pH sensing let us focus more on the development of more stable spiranic analogs (Figure c).
- The development of spiranic chiral frameworks had an initial synthetic challenge. The initial synthetic strategy that was followed from the literature as accessible gram scale synthesis, appeared later on to have a problem with the chiral resolution methodology. Our findings were also confirmed by others in the literature. Therefore a different pathway was taken rendering only small quantities. Both, the instability of chiral frameworks bearing allenes, and the small scale synthesis of spiranes, hampered the pH studies in film. On the other hand, a very positive finding was the synthesis of All-Carbon-Double-Helices from spiranes, as well as Flexible Shape-Persistent Macrocycles, that not only enables the use of spiranes for pH sensing, but also opens the possibility for chiroptical monitoring of deformations of materials (Figure c).

D4. Colaboraciones con otros grupos de investigación directamente relacionadas con el proyecto

Relacione las colaboraciones con otros grupos de investigación y el valor añadido para el proyecto. Describa, si procede, el acceso a equipamientos o infraestructuras de otros grupos o instituciones.

- F. Klappenberger, TUM, Germany: XPS, for the characterization of the surfaces functionalized with Up-Standing Chiral Architectures.
- R. Chiechic, Groningen University, Holland: Ellipsometry, for the characterization of the surfaces functionalized with Up-Standing Chiral Architectures.
- A. Kartouzian, TUM, Germany: Surface and Gas Spectroscopies, for the characterization of the chiroptical surfaces.
- S. Chiussi, UVigo, Spai: Surface Processing and Characterization, for the construction of appropriate transparent substrates.
- A. Guerrero, UCM, Spain: Plasmonic Nanoparticles, for the formation and characterization of metal nanoparticles with Up-Standing Chiral Architectures.
- A. G. Petrovic, NYIT, New York: Chiroptical Simulations, for the molecular dynamic simulations of spiranic compounds.
- H. Xu, Central South University, China. Synthesis of spirane building blocks.

D5. Colaboraciones con empresas o sectores socioeconómicos directamente relacionados con el proyecto

Relacione las colaboraciones con empresas o sectores socioeconómicos y el valor añadido que aporta al proyecto.



The development of the chiroptical materials in this project will certainly be of interest for industry after certain improvement of the systems in hand.

D6. Actividades de internacionalización y otras colaboraciones relacionadas con el proyecto
Indique si ha colaborado con otros grupos o si ha concurrido, y con qué resultado, a alguna de las convocatorias de ayudas (proyectos, formación, infraestructuras, otros) de programas europeos y/o a otros programas internacionales, en temáticas relacionadas con la de este proyecto. Indique el programa, socios, países y temática y, en su caso, financiación recibida.

- The PI is currently coordinating the network Chiroptics (<http://www.chiroptics.net/research-groups.html>). This project certainly benefited from the network with several collaborations.
- In May 2016, all 10 members of the network met in Madrid for a [workshop](#).
- In April 2017, the international meeting [Chiroptics 2017](#) will serve to show the network to a larger community and work together for the development of chiroptical everyday applications.
- Silvia Castro Fernández had two stays of a total of three months at NYIT with A. Petrovik for the molecular dynamics analysis.
- Sandra Miguel Lago had a stay at TUM for theoretical prediction of self-assembly on surfaces and Host-Guest processes with COHCs and in Erlangen for the development of redox-chiroptical COHCs (total three months).
- Ani Ozcelik was two weeks at University Complutense of Madrid with A. Guerrero for the functionalization of nanoparticles with UCAs.

New funding obtained related to this project: (for more information see www.smartchiralframeworks.com/funding.html)

- ED431F 2016/005, Proyectos de Excelencia, Spiranes as Building Blocks for the Construction of Chiroptical Helical Architectures, PI José Lorenzo Alonso Gómez, Xunta de Galicia, 2016 – 2019, 90.000 €
- CTQ2015-71924-REDT, Redes de Excelencia, CHIROPTICAL systems, PI José Lorenzo Alonso Gómez, MINECO, 2015 – 2017, 25.000 €
- German Research Foundation, Alkyne-based Carbon Nanomaterials: On-surface Synthesis and Complementary Characterization, PI: F. Klappenberger, TUM Munich, Participants: F. Klappenberger, TUM Munich, Germany and J. L. Alonso-Gómez, UVigo, Spain, Chiral Frameworks. 2016-2019, 228.100 €
- CTQ2014-58629-R, Retos de Investigación, Molecular and Supramolecular Systems for Chiroptical Sensing, PI José Lorenzo Alonso Gómez (From Allenes to Spiranes, Helical Cages, Netanes, Upstanding Chiral Architectures, Chiroptical Sensing). PI María Magdalena Cid Fernández (Allenophanes, Chiral Gels, Molecular Recognition) 2015 – 2017, 100.430 €

E. Difusión de los resultados del proyecto

E1. Publicaciones científico-técnicas (con peer-review) derivadas del proyecto y, en su caso, patentes

Autores, título, referencia de la publicación*...

(for more information see www.smartchiralframeworks.com/articles.html)

A. Ozcelik, R. Pereira-Cameselle, A. von Weber, M. Carlottic, J. P. Coelho, T. Nobelen, C. Pérez, X. R.



Nóvoa, A. Guerrero-Martínez, R. C. Chiechic, S. Chiussi, A. Kartouzian, F. Klappenberger, J.L. Alonso-Gómez

Chiroptical Surfaces through Monolayer-Thin Up-standing Chiral Architectures
manuscript under preparation

S. Castro-Fernández, R. Yang, H. Xu, A. G. Petrovic, and J. L. Alonso-Gómez
Access to All-Carbon Double Helices and Chiral Flexible Shape-Persistent Macrocycles through the Use
of Diethynylspiranes
manuscript under preparation

COHCs video Abstract

S. Míguez-Lago, M. M. Cid, J. L. Alonso-Gómez
Covalent Organic Helical Cages as Sandwich Compound Containers
European Journal of Organic Chemistry, 2016, 34, 5716–5721.

S. Míguez-Lago, A. L. Llamas-Saiz, M. M. Cid, J. L. Alonso-Gómez
A Covalent Organic Helical Cage with Remarkable Chiroptical Amplification
Chemistry - A European Journal, 2015, 21, 18085 –18088.

S. Castro-Fernández, M. M. Cid, C. S. López, J. L. Alonso-Gómez
Opening access to new chiral macrocycles: from allenes to spiranes
Journal of Physical Chemistry A, 2015, 119. 1747–1753.

Y-Q. Zhang, M. A. Öner, I. R. Lahoz, B. Cirera, C-A. Palma, S. Castro-Fernández, S. Míguez-Lago, M.
M. Cid, J. V. Barth, J. L. Alonso-Gómez, F. Klappenberger
Morphological Self-assembly of Enantiopure Allenes for Upstanding Chiral Architectures at Interfaces
Chemical Communications, 2014, 50, 15022–15025.

*Resalte en negrita las realizadas por el IP

E2. Asistencia a congresos, conferencias o workshops relacionados con el proyecto

Nombre del congreso, tipo de comunicación (invitada, oral, póster), autores

(for more information see www.smartchiralframeworks.com/talks.html)

April, 5-8th April Chiroptics 2017, Munich
Understanding Chirality for the Design of Tailored Chiroptical Systems

April, 5-8th April Chiroptics 2017, Munich
Chiroptical Surfaces through Monolayer-Thin Up-standing Chiral Architectures

May, 13th 2016, Chiroptics 2016, Madrid, Spain
Control of Chiroptical Responses through Molecular Design

December, 7–10th 2015 IC3TC, Lisbon, Portugal
Chiroptical Systems on the Road to Sensing

October, 13th 2015 Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen, Germany
Chiroptical Amplification through Conformational Confinement and Self-Assembly

July, 20th 2015 XXXV Congreso Bienal de la Real Sociedad Española de Química, A Coruña, Spain
Chirality Transfer from Single Molecules to Surface-Confined Nanostructures



June, 5th 2015 InTechSE, Vigo, Spain
Chiroptics through Chiral Axes

December, 11th 2014 Jornadas de Seguimiento MINECO, Madrid, Spain
[14₂] Alenofanos Quirales: Síntesis, Propiedades Quirópticas y Aplicaciones

October, 3rd 2014 Columbia University, New York, USA
Chiral Amplification in Molecular and Supramolecular Frameworks

E3. Otras publicaciones derivadas de colaboraciones mantenidas durante la ejecución del proyecto y que pudieran ser relevantes para el mismo, así como artículos de divulgación libros y conferencias

Autores, título, referencia de la publicación...

A. G. Petrovic, N. Berova, J. L. Alonso-Gómez
Absolute Configuration and Conformational Analysis of Chiral Compounds via
Experimental and Theoretical Prediction of Chiroptical Properties: ORD, ECD, and VCD
in Struct. Elucidation Org. Chem. Search Right Tools, 2015, pp. 65–104.

Conformational stable alleno-acetylenic cyclophanes bearing chiral axes
I. R. Lahoz, S. Castro-Fernández, A. Navarro-Vázquez, J. L. Alonso-Gómez, M. M. Cid
Chirality, 2014, 26, 563–573.

Preparation and characterization of a halogen-bonded shape-persistent chiral alleno-acetylenic inclusion
complex

S. Castro-Fernandez, I. R. Lahoz, A. L. Llamas-Saiz, J. L. Alonso-Gómez, M. M. Cid, A. Navarro-
Vazquez
Organic Letters 2014, 16, 1136–1139.

Cyanobuta-1,3-dienes as novel electron acceptors for photoactive multicomponent systems
F. Tancini, F. Monti, K. Howes, A. Belbakra, A. Listorti, W. B. Schweizer, P. Reutenauer, J. L. Alonso-
Gómez, C. Chiorboli, L. M. Urner, J. P. Gisselbrecht, C. Boudon, N. Armadori, F. Diederich
Chemistry - A European Journal 2014, 20, 202–216.

Acetylenic homocoupling methodology towards the synthesis of 1,3-butadiynyl macrocycles: [14₂]-Alleno-
acetylenic cyclophanes

I. R. Lahoz, A. Navarro-Vázquez, J. L. Alonso-Gómez, M. M. Cid
European Journal of Organic Chemistry 2014, 9, 1915–1924.

F. Gastos realizados durante la ejecución del proyecto

Debe cumplimentarse este apartado independientemente de la justificación económica anual enviada por la entidad. Se deben incluir los principales conceptos de gastos con su importe, no el desglose de las facturas del proyecto, para valorar su adecuación a los objetivos y



actividades realizadas en el proyecto. Es indispensable especificar si el gasto estaba previsto en la solicitud original.

F1. Gastos de personal (indique número de personas, situación laboral y función desempeñada)					Previsto en la sol. original (S/N)
	Nombre	Situación laboral	Función desempeñada	Importe	
1	Ani Özçelik	Estudiante doctorado	Investigación	22.512,74	S
2	Silvia Castro Fernandez	Estudiante doctorado	Investigación	24.021,11	S
Total gastos de personal:				46.533,85	

F2. Material inventariable (describa el material adquirido)				
	Equipo	Descripción del equipo	Importe	Previsto en la sol. original (S/N)
1	Armario frigorífico	Nevera para guardar reactivos y productos	562	S
2	Pack armoire acide/base 60	Armario con ventilación para almacenaje de disolventes y reactivos	821,1	S
3	Agitador mag. C/calef.	Agitador magnético para reacciones a temperatura ambiente o calentando	358,79	S
Total gastos material inventariable			1741,89	

F3. Material fungible (describa el tipo de material por concepto o partida, p. ej., reactivos, material de laboratorio, consumibles informáticos, etc.)			
	Concepto	Importe	Previsto en la sol. original (S/N)
1	Reactivos químicos, gases y disolventes	10.497,11	S
2	Fungible laboratorio	7.874,67	S
Total gastos material fungible		18.371,78	

F4. Viajes y dietas (describa la actividad del gasto realizado y las personas que han realizado la actividad). Debe incluir aquí los gastos derivados de la asistencia a congresos, conferencias, colaboraciones, reuniones de preparación de propuestas relacionados con este proyecto, etc.)					
	Concepto	Relación con el proyecto	Importe	Nombre del participante	Previsto en sol. original (S/N)
1	Viaje universidad Munich	MEDIDAS DE CD Y STM, caracterización superficies quirales	414	JOSE LORENZO ALONSO GOMEZ	S
2	Desplazamiento a Munich	MEDIDAS CD Y SJM, caracterización superficies quirales	357	JOSE LORENZO ALONSO GOMEZ	S



3	Asistencia a la bienal en Coruña-peaje-km-alojamiento-manutención	Difusión resultados	445,95	JOSE LORENZO ALONSO GOMEZ	S
4	Inscripción congreso XXXV BIENAL RSEQ	Inscripción congreso para difusión resultados	350	JOSE LORENZO ALONSO GOMEZ	S
5	Inscripción congreso IC3TC 2015	Inscripción congreso para difusión resultados	300	JOSE LORENZO ALONSO GOMEZ	S
6	Desplazamiento de Fahim Rofique a Vigo	Desarrollo de trabajo computacional, mecánica molecular. Estudiante de doctorado de una de los colaboradores del proyecto Ana Petrovic	362,85	FAHIM ROFIQUE	
7	Desplazamiento a Madrid	ASIST. PRIMEIRO ENCONTRO CHIROPTICS NETWORK	344,09	JOSE LORENZO ALONSO GOMEZ	
Total viajes y dietas			2.573,89		

F5. Otros gastos (describa la actividad del gasto por concepto, y si procede, las personas que han realizado la actividad)

	Concepto	Relación con el proyecto	Importe	Nombre del participante	Previsto en la sol. original (S/N)
1	Gastos imprenta	Impresión documento científico	263,89	Ani Ozcelik	S
2	Análisis	Análisis realizados en el CACTI para determinación estructural	117,4	Ani Ozcelik y Silvia Castro	S
Total otros gastos			381.29		

F6. Descripción de gastos no contemplados en la solicitud original (si ha realizado algún gasto no contemplado en la solicitud original, se **debe** justificar la necesidad de su adquisición en este apartado)

Gasto	Justificación

G. Resumen de gastos realizados durante la ejecución del proyecto

Desglose los gastos por conceptos	Importe:
--	-----------------



MINISTERIO
DE ECONOMÍA, INDUSTRIA
Y COMPETITIVIDAD

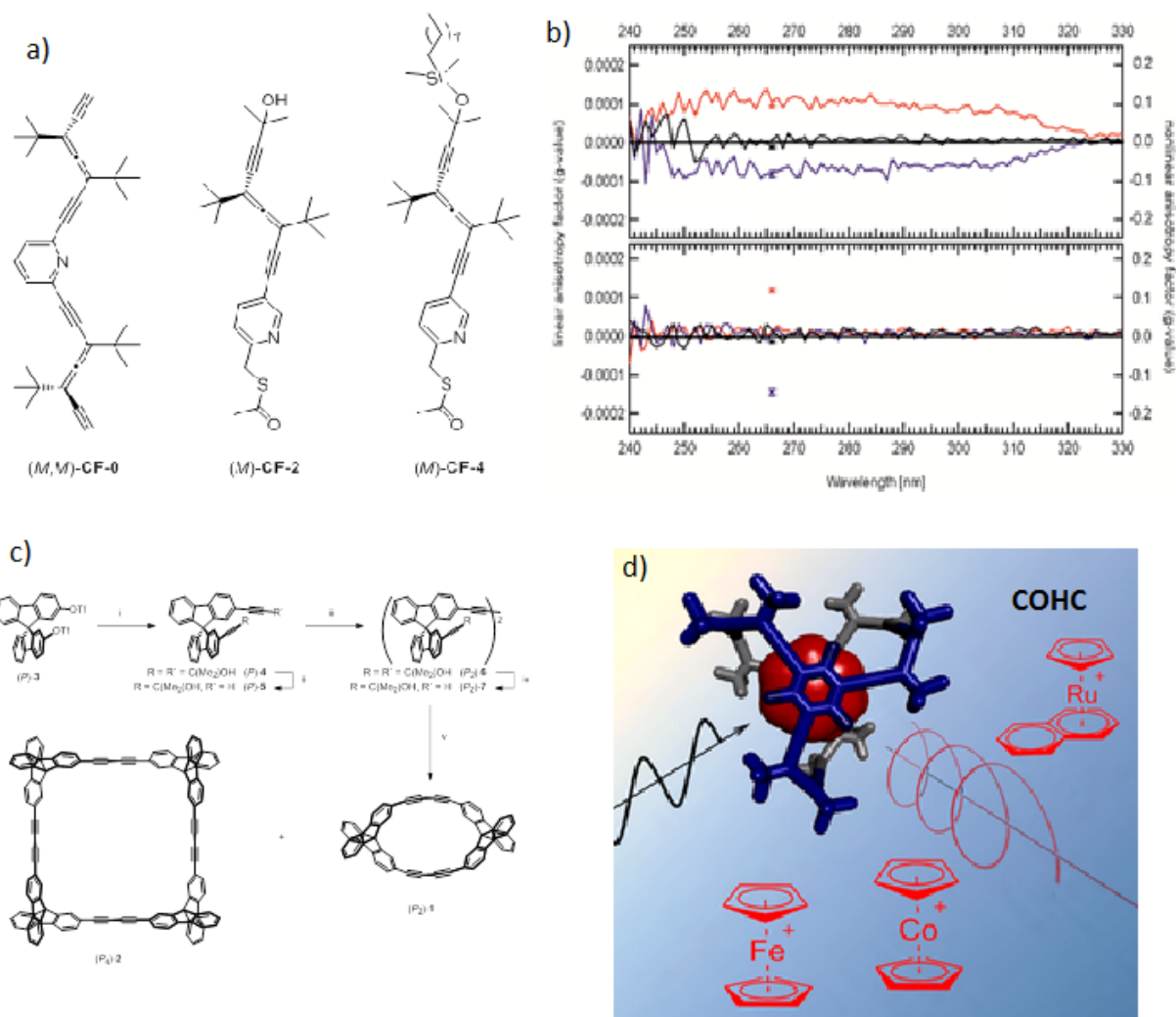


DIVISIÓN DE COORDINACIÓN,
EVALUACIÓN Y SEGUIMIENTO
CIENTÍFICO Y TÉCNICO

SUBDIVISIÓN DE PROGRAMAS
TEMÁTICOS CIENTÍFICO-
TÉCNICOS

Personal:	46.533,85
Inventariable:	1.741,89
Fungible:	18.371,78
Otros gastos:	381,29
Importe total ejecutado	67.028,81
Importe total concedido:	84.700

Figures





Artículo 15 de la resolución de la convocatoria

15.4. Para el seguimiento científico-técnico de las actividades, los beneficiarios deberán presentar la siguiente documentación:

- Cuando los proyectos tengan una duración plurianual, un informe de seguimiento en la la mitad del período de ejecución del proyecto.
- Tanto en los proyectos de duración anual como en los plurianuales, un informe final en el plazo de tres meses a contar desde el día siguiente a la finalización del periodo de ejecución del proyecto.

15.5 Los informes de justificación científico-técnica deberán contener la siguiente información:
Los informes de justificación científico-técnica deberán contener la siguiente información:

- a) Desarrollo de las actividades, cumplimiento de objetivos propuestos en la actuación, así como el impacto de los resultados obtenidos evidenciados, entre otros, mediante la difusión de resultados en publicaciones, en revistas científicas, en libros, en presentaciones en congresos, en acciones de transferencia, en patentes, en internacionalización de las actividades, en colaboraciones con grupos nacionales e internacionales y, en su caso, en la formación de personal investigador;
- b) cualquier cambio respecto a los gastos contemplados en el presupuesto incluido en la solicitud inicial del proyecto, justificando adecuadamente su necesidad para la consecución de los objetivos científico-técnicos del proyecto subvencionado;
- c) cualquier modificación en la composición y dedicación del equipo de investigación, siempre que haya sido autorizada por la Subdirección General de Proyectos de Investigación;
- d) cualquier modificación de la composición del equipo de trabajo respecto al inicialmente previsto en la memoria científico-técnica del proyecto.

Instrucciones para la elaboración del Informe intermedio científico-técnico

Apartado A. Se deben indicar los datos actuales del proyecto. Si ha habido alguna modificación en los datos iniciales del proyecto debe indicarlo en el Apartado **A2**.

Apartado B. Debe relacionar la situación de **todo** el personal que haya realizado actividades en el proyecto en el periodo que se justifica, tanto si forma parte del equipo de investigación como del equipo de trabajo.

Apartado C. Debe hacer un resumen de los principales avances y logros del proyecto durante su ejecución.

Apartado D. Se reflejará el progreso de las actividades del proyecto y el cumplimiento de los objetivos propuestos.

D1. Se describirá el grado de cumplimiento de los objetivos planteados en el proyecto.

D2. Se describirán las actividades científico-técnicas desarrolladas para alcanzar los objetivos planteados en el proyecto.



Se debe informar sobre el progreso y la consecución de todos los objetivos inicialmente planteados con el detalle suficiente para poder valorar el grado de cumplimiento, así como las actividades realizadas y los resultados alcanzados.

D3. Se reflejarán las dificultades o problemas que hayan podido surgir en el desarrollo del proyecto, así como la repercusión en el proyecto. Si se hubieran propuesto soluciones para superar dichas dificultades, también deberán reflejarse también en este apartado.

Se entiende que estas situaciones son inherentes a la propia actividad científica, pero se debe informar y ayudar a valorar su alcance.

D4. y D5. Se relacionarán, si las ha habido, las colaboraciones con otros grupos de investigación que tengan relación directa con el proyecto y con empresas o sectores socioeconómicos.

Las actividades de colaboración deben detallarse y justificarse adecuadamente, especialmente cuando hayan implicado gasto o haya sido necesaria su realización con posterioridad a la presentación de la solicitud.

D6. Debe describir las actividades de internacionalización y otras colaboraciones relacionadas con el proyecto.

Apartado E. Se reflejará la difusión de los resultados del proyecto.

E1. Se relacionarán únicamente las publicaciones derivadas directamente del presente proyecto, remarcando las realizadas por el investigador principal.

E2. Se relacionarán la asistencia a congresos, conferencias o workshops relacionados con el proyecto, con indicación del título de la ponencia, nombre del congreso/conferencia y de las personas que hayan asistido.

E3. Se referenciarán otras publicaciones relacionadas con la temática del proyecto o fruto de colaboraciones durante la ejecución del proyecto.

Apartado F. Se detallarán los gastos realizados durante la ejecución del proyecto..

Se pretende poder relacionar el gasto realizado en el proyecto con el presupuesto solicitado inicialmente y valorar su adecuación a los objetivos y actividades realizados en el proyecto. En el caso de que el gasto no estuviera previsto inicialmente, deberán justificarse detalladamente las razones de dicho gasto.

En los subapartados F1 al F5 se deben mencionar los principales gastos realizados agrupados por tipo de gasto. Se trata de conocer los principales conceptos de gasto, no el desglose de todas las facturas del proyecto.

En el subapartado F6, gastos no contemplados en la solicitud original, es importante que se detallen las necesidades de la ejecución del gasto para el desarrollo del proyecto.

Apartado G. Se detallarán de forma general los gastos realizados durante el total del periodo de ejecución del proyecto, agrupados por tipo de gasto.