

REPÚBLICA DE CHILE
UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE CHILE
DEPARTAMENTO DE RELACIONES INTERUNIVERSITARIAS E
INTERNACIONALES

APRUEBA CONVENIO ENTRE LA UNIVERSIDAD DE
SANTIAGO DE CHILE Y EL LABORATORIO INTERNACIONAL
ASOCIADO (LIA)

SANTIAGO, 002390 29.04.19.

VISTOS: El DFL. N° 149 de 1981, del Ministerio de Educación, y
la Resolución N° 1600, de 2008, de la Contraloría General de la República.

CONSIDERANDO:

La importancia para la Universidad de Santiago de Chile de
promover la cooperación académica e interinstitucional e internacional y fomentar las relaciones bilaterales de carácter
académico.

RESUELVO:

APRUEBESE el convenio, suscrito entre la Universidad de
Santiago de Chile y el Laboratorio Internacional Asociado (LIA), Francia, con fecha 5 de marzo de 2018 y cuyo texto es el
siguiente:

**CONVENIO DE CREACIÓN DEL
LABORATOIRE INTERNATIONAL ASSOCIE (LIA)
(LABORATORIO INTERNACIONAL ASOCIADO)**

**“Moléculas y materiales multifuncionales”
“LIA M3”**

ENTRE, POR UN LADO

La **PONTIFICIA UNIVERSIDAD CATÓLICA DE VALPARAÍSO** en adelante denominada **“PUCV”**, institución de derecho
público de carácter científico y profesional, cuya sede principal se encuentra ubicada en Avenida Brasil 2950, casilla 4059
Valparaíso (Chile), representada por su Rector, **Claudio Elórtegui Raffo**,

Y

La **UNIVERSIDAD DE CHILE** en adelante denominada **“Uchile”**, institución de derecho público de carácter científico y
profesional, cuya sede principal se encuentra ubicada en Av. Libertador Bernardo O’Higgins 1058 Santiago (Chile),
representada por su Rector, **Ennio Vivaldi Vejár**,

Y

La **UNIVERSIDAD NACIONAL ANDRES BELLO**, en adelante denominada **« UNAB »** institución de derecho público de
carácter científico y profesional, cuya sede principal se encuentra ubicada en Avenida República 275, Santiago (Chili),
representada por su Rector, **José Rodríguez Pérez**,

Y

La **UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE CHILE**, en adelante denominada **« USACH »** institución de derecho público de
carácter científico y profesional, cuya sede principal se encuentra ubicada en Casilla 40, Correo 33, Santiago (Chili),
representada por su Rector, Monsieur **Juan Manuel Zolezzi Cid**

Y, POR OTRO LADO

El **CENTRE NATIONAL DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**, en adelante denominado **“CNRS”**, institución pública de
carácter científico y tecnológico, con sede en 3 rue Michel Ange, 75794 París Cedex 16 (Francia), representado por su
Presidente- Director General, **Antoine Petit**,

Y

La **UNIVERSIDAD DE RENNES 1**, en adelante denominada **“UR1”**, institución pública de carácter científico, cultural y
profesional, con sede en 2, rue du Thabor- CS 46510 -35065 Rennes (Francia), representada por su Presidente, **David
Alis**

Y

La **ECOLE NATIONALE SUPERIEURE DE CHIMIE DE RENNES**, en adelante denominada **« ENSCR »**, institución
pública de carácter administrativo, con sede en 11 allée de Beaulieu, CS 50837, 35708 Rennes Cedex 7, representada
por su Director, **Pierre Le Cloirec**



Y

El INSTITUT NATIONAL DES SCIENCES APPLIQUEES de RENNES, en adelante denominado « INSa », institución pública de carácter científico, cultural y profesional, con sede en 20 Avenue des Buttes de Coësmes, CS 70839, 35708 Rennes Cedex 7, representado por su Directeur, r M^Hamed Drissi,

El CNRS, la UR1, la ENSCR y el INSa obrando en nombre y por cuenta del Laboratorio «Institut des Sciences Chimiques de Rennes» (UMR 6226), 263 avenue du Général Leclerc, F-35042 Rennes Cedex, dirigido por Marc Fourmigué en adelante denominado ISCR,

El CNRS, la UR1, la ENSCR, el INSa, la PUCV, la UChile, la UNAB, et laUSACH, denominados colectivamente en lo sucesivo como "las Partes", o individualmente como "la Parte"

Considerando

Considerando el Acuerdo entre el gobierno de la República de Chile y el gobierno de la República francesa para el desarrollo de investigaciones científicas conjuntas, firmado en Santiago el 24 de octubre de 1994,

Considerando el Acuerdo entre la Comisión Nacional de Investigación Científica y Tecnológica (CONICYT) de la República de Chile y el Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS) de Francia firmado el 9 de julio de 1991 y renovado el 13 de diciembre de 2004,

SE HA CONVENIDO LO SIGUIENTE :

PREÁMBULO

La colaboración científica entre equipos del Institut des Sciences Chimiques de Rennes (ISCR, UMR 6226) y diferentes grupos de investigación chilenos se ha desarrollado e intensificado en el marco del anterior LIA MIF (2009-2016). Esta fructuosa cooperación científica se ha traducido en :

- 60 publicaciones co-firmadas en revistas internacionales con comité de lectura;
- 4 tesis en co-tutela defendidas y otras dos actualmente en curso;
- La organización de dos simposios (los 9-10 enero 2013 en Valparaíso y el 1° de julio del 2016 en Rennes) reuniendo en cada ocasión la casi totalidad de los actores (doctorandos y permanentes) de la cooperación;
- Numerosos intercambios de investigadores y docentes-investigadores (entorno a 50 misiones, de una duración media de dos semanas por ambos lados) ;
- la formación a través de la investigación de una veintena de doctorandos, postdoctorandos y jóvenes investigadores chilenos, en particular mediante pasantías de investigación entre un mes y un año efectuadas en los laboratorios del ISCR.

Nuestra política es continuar y reforzar los lazos fructuosos desarrollados a lo largo de estos últimos diez años mediante la creación de un nuevo Laboratorio Internacional Asociado en el campo de las moléculas y materiales multifuncionales (LIA M3), cuyo objetivo será de amplificar y sostener la cooperación mediante los aportes equilibrados por ambos países.

En el seno de este nuevo LIA M3, los equipos franceses y chilenos, algunos de ellos unidos por lazos casi permanentes desde hace más de veinte años a través de convenios bilaterales y/o multicruzados formalizados, van a seguir poniendo en común sus trabajos complementarios, sus competencias y recursos en el ámbito de la síntesis, de los análisis espectroscópicos, estructurales, teóricos así como en la medición de las propiedades fisico-químicas de los nuevos compuestos y materiales preparados, con el objetivo de fortalecer y consolidar esta abundante cooperación científica en química inorgánica entre nuestros dos países.

Los principales ejes del programa científico aparecen detallados en el ANEXO 1. Todos presentan un aspecto aplicativo en respuesta a una fuerte demanda de la sociedad, teniendo por objetivo el desarrollo de materiales moleculares, híbridos y sólidos que posean propiedades ópticas (no lineales y/o de luminiscencia), magnéticas y catalíticas. Semejantes propiedades fisico-químicas se buscan para aplicaciones en numerosos campos, como por ejemplo, en la química fina, en el tratamiento y transporte de información, en el alumbrado a bajo costo, en la detección de iones con interés biológico, en el almacenamiento de gas o de principios activos, en las células solares o en el biomarcado.

TÍTULO 1 – CREACIÓN, DURACIÓN, DENOMINACIÓN, OBJETO Y COMPOSICIÓN

Artículo 1 - Creación y duración:

El LIA se constituye a partir del 1^{er} de enero de 2018 por un plazo de cuatro (4) años.

Artículo 2 - Denominación

El LIA se denominará "Moléculas y materiales multifuncionales"
Su abreviación será "M3"

Artículo 3 - Objeto

El objeto de la colaboración del LIA es la realización del programa científico descrito en el Anexo 1, denominado en adelante el "Programa", el cual forma parte integrante del presente Convenio.

Artículo 4 - Composición

El LIA está constituido por las unidades y/o los equipos siguientes :

Por el lado francés :

UMR 6226 «Institut des Sciences chimiques de Rennes», CNRS/Université de Rennes 1 / ENSC Rennes / INSA Rennes
Equipes Organometálicas: Matériaux et Catalyse (OMC), Chimie Théorique Inorganique (CTI) et Chimie du Solide et Matériaux (CSM)

Por el lado chileno :

PUCV, Facultad de Ciencias, Instituto de Química
UCHile : Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Facultad de Ciencias
UNAB: Facultad de Ecología y Recursos Naturales
USACH: Facultad de Química y Biología

Artículo 5 - Naturaleza de la cooperación

El LIA no está investido de ninguna personalidad moral ni capacidad jurídica.

El presente Convenio no tiene por objeto, ni por efecto, y ninguna disposición del mismo podrá ser interpretada en el sentido de constituir, crear, poner en funcionamiento, o reconocer la creación de una empresa común, un mandato, una sociedad, una agrupación de interés o cualquier otra agrupación o entidad comercial, o sociedad de hecho entre las Partes.

TÍTULO II - ORGANIZACIÓN DEL LIA

Artículo 6 – Responsables científicos

El LIA es administrado por dos (2) responsables científicos. La responsabilidad científica y la gestión del programa serán asumidas conjuntamente:

Por el Institut des Sciences chimiques de Rennes CNRS / Université de Rennes 1 / ENSC Rennes / INSA Rennes:
Jean-René Hamon
Por el Instituto de Química, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso : Carolina Manzur

Ellos mismos establecerán el programa del LIA, el presupuesto provisional y los reportes científicos y financieros anuales que presentarán al Comité de Dirección.

Artículo 7 - Comité de Dirección

7.1. - Composición:

Se establecerá un Comité de Dirección compuesto por 10 miembros:

Por la parte francesa:

- El Director científico del instituto de química (INC) del CNRS (o su representante)
- El Presidente de la Université de Rennes 1 (o su representante)
- El Director de ENSCR (o su representante)
- El Director de l'ISCR
- Un (1) experto científico nombrado por el CNRS

Por la parte chilena :

- El presidente de la Pontificia Universidad Católica de Valparaíso (o su representante)
- Un representante de la UChile
- Un representante de la Universidad Nacional Andres Bello
- Un representante de la Universidad de Santiago de Chile
- El Director del Instituto de química de la PUCV

Cada uno de los miembros tendrá derecho a un voto.

Cada Parte podrá invitar a las reuniones del Comité de Dirección a miembros de su organización administrativa y/o a personalidades ajenas, siempre que firmen un acuerdo de confidencialidad. Dichos invitados participarán a título consultivo.

Los Responsables científicos del LIA, asistirán a las reuniones del Comité de Dirección a título consultivo.



7.2. - Presidencia:

La presidencia del Comité de Dirección será ejercida por uno de sus miembros, designado por un periodo de dos (2) años. El Presidente informará a las Partes sobre los resultados obtenidos y los medios financieros utilizados.

7.3. - Reunión:

El Comité de Dirección se reunirá al menos una vez cada dos (2) años, y a instancias de su Presidente, o de sus responsables científicos tantas veces como el LIA lo considere oportuno.

Las decisiones del Comité de Dirección se adoptarán por el voto favorable de la mayoría absoluta, $\frac{3}{4}$ de sus miembros presentes o representados, cada Parte estando representada.

En caso de imposibilidad física para reunir físicamente del Comité de Dirección, las decisiones del Comité de Dirección podrán tomarse mediante teleconferencia o por escrito.

7.4. - Función:

El Comité de Dirección:

- se pronunciará sobre el estado, el programa y la orientación de las investigaciones;
- formulará recomendaciones sobre los medios presupuestarios necesarios para el funcionamiento del LIA;
- informará a las Partes de los resultados obtenidos y los medios financieros utilizados.

Este podrá deliberar sobre cualquier otro asunto referente al LIA.

TÍTULO III - MEDIOS FINANCIEROS Y PERSONALES

Artículo 8 - Disposiciones financieras

Cada año, los dos responsables científicos del LIA elaborarán el presupuesto necesario para realizar los trabajos de investigación del LIA, y lo presentarán al Comité de Dirección para su aprobación. Dicho presupuesto incluye tanto la expresión de las necesidades como los recursos correspondientes detallados según la Parte que los financie.

El Anexo 2, que forma parte del presente Convenio para todos los efectos legales, presenta el presupuesto previsible para el primer año en el que se precisan las contribuciones de las Partes así como la propuesta de utilización de los fondos. Dicho anexo se actualizará anualmente, luego de la deliberación del Comité de Dirección.

Cada Parte decidirá que recursos aportará y administrará sus créditos correspondientes a su propio financiamiento.

Además de las atribuciones presupuestarias, cada Parte administrará bajo su responsabilidad y sus competencias, según sus propias normas, todos los recursos que pone a disposición en el marco del LIA: equipamientos, locales, instalaciones y personal.

Una vez por año, cada Parte deberá justificar ante las demás, los medios efectivamente asignados durante el año transcurrido (incluyendo los equipos, los locales y el personal) a LIA. A tal efecto, cada Parte establecerá un balance de los medios financieros asignados y de su utilización (gastos). A título informativo, deberá indicarse el monto de las dotaciones que sirvan a las amortizaciones de los materiales puestos a disposición del LIA (*según la duración en vigor para cada Parte*).

La financiación utilizada por cada Responsable científico para el programa del LIA descrito en el Anexo 1, podrá ser verificada al final del año ante la simple petición de una persona habilitada de la otra Parte. Además, los créditos empleados por cada responsable científico para el LIA estarán sujetos a los habituales controles de los países respectivos a fin de verificar la regularidad de su utilización con respecto al objeto del Convenio.

Artículo 9 - Personal

El personal solicitado por los Responsables científicos en el marco del LIA, dependerá totalmente del organismo de origen y éste efectuará su trabajo según las instrucciones de sus superiores jerárquicos. A tal efecto, los Responsables científicos se concertarán sobre las modalidades, el calendario y la dimensión de la participación de dicho personal en el cumplimiento del programa científico conjunto. El Anexo 3 establece dicha participación para el primer año de creación del LIA. Toda modificación deberá ser inmediatamente comunicada a las Partes y dará lugar a la actualización del Anexo 3.

El uso de las instalaciones y/o equipos de las Partes por el personal de las Partes está sujeto a las normas de higiene y seguridad definidas por la Parte propietaria.

El personal de una Parte puede acceder a los efectos del LIA a los locales de las otras Partes, con sujeción a las normas de procedimiento de los locales de la Parte accedida y, eventualmente, a la firma de un convenio de acceso.

Artículo 10 - Contratos de investigación

Los contratos de investigación que el LIA desee suscribir con organismos terceros, públicos o privados, franceses o extranjeros, serán firmados por todas las Partes.

Dichos contratos serán negociados por el CNRS. La Parte autorizada mantendrá informada a las demás de los resultados de las negociaciones. Estas dispondrán de un plazo de quince (15) días corridos para dar su dictamen. Vencido este plazo, el dictamen se considerará favorable.

Los contratos de investigación serán administrados por la Parte que ha llevado a cabo la negociación. No obstante, el Comité de dirección del LIA podrá decidir que la gestión de uno o de varios contratos esté a cargo de otra Parte. En este caso, deberá comunicar su decisión a cada Parte.

Las cláusulas de confidencialidad incluidas en dichos contratos de investigación no deberán impedir a los investigadores involucrados mencionar el avance de sus trabajos en su informe de actividad, lo cual no constituye una divulgación en el sentido de la propiedad intelectual.

Para los contratos de investigación que estén administrados por el CNRS y que impliquen gastos de personal, se hará una deducción del importe de la remuneración, sin impuestos, incluidas las cargas sociales y patronales, para constituir una provisión para pérdidas de empleo. La base de esta retención estará constituida por la remuneración bruta, imponible del personal y su índice se fija anualmente por la Dirección del CNRS.

TÍTULO IV – PROPIEDAD INTELECTUAL

Artículo 11 - Publicaciones

Cada Parte se compromete a comunicar a las otras todas las informaciones que sean necesarias para realizar los trabajos de investigación en común. La publicación de los resultados científicos tendrá lugar con arreglo a los usos y costumbres de la comunidad científica.

Las publicaciones resultantes de los trabajos efectuados en común en el seno del LIA son publicaciones comunes firmadas conjuntamente por los miembros del LIA que hayan participado a dichas investigaciones. Estas incluirán obligatoriamente la siguiente mención: ***“Investigaciones efectuadas en el marco del Laboratorio Internacional Asociado M3”***.

Durante la vigencia del presente Convenio y durante los dos (2) años subsiguientes, toda publicación resultante de los trabajos efectuados en común en el seno del LIA deberá recibir la autorización de las otras Partes quienes darán a conocer su decisión por escrito en un plazo límite de (2) dos meses contados a partir de la recepción del proyecto de publicación. Pasado este plazo y sin oposición explícita, el acuerdo se considerará obtenido.

Por consiguiente, todo proyecto de publicación será presentado para dictamen de las Partes interesadas quienes podrán suprimir o modificar ciertas precisiones cuya divulgación pudiese perjudicar la explotación industrial o comercial, en condiciones favorables, de los resultados obtenidos de los trabajos efectuados en común en el seno del LIA. Dichas supresiones o modificaciones no deberán alterar el valor científico de la publicación.

Artículo 12 – Confidencialidad

Las Partes se comprometen a que las informaciones intercambiadas en el marco del LIA e identificadas como confidenciales (en adelante « Informaciones Confidenciales »):

- a) Se mantengan estrictamente confidenciales y sean tratadas con el mismo grado de protección que las Partes utilicen en sus propias Informaciones Confidenciales
- b) Sean comunicadas solamente al personal que deba conocerlas y no se utilice dicha información salvo para el objeto del presente Convenio durante un plazo de cuatro (4) años contados a partir de la fecha de su comunicación

Toda comunicación o utilización de las Informaciones Confidenciales implica el consentimiento previo y escrito de la Parte que las comunica. Cada Parte se compromete a que el personal mencionado en el párrafo b) respete las disposiciones del Convenio.

No obstante, cada Parte podrá comunicar las Informaciones Confidenciales siempre que pueda probar:

- Que estaban disponibles públicamente antes de su comunicación o con posterioridad a esta, siempre y cuando no exista una falta que se le pudiese imputar
- Que fueron recibidas de un tercero, sin obligación de confidencialidad, de forma lícita
- Que estaban ya en su posesión antes de la celebración del Convenio
- Que fueron desarrolladas de forma independiente y de buena fé por los miembros de su personal sin acceso a dichas Informaciones Confidenciales

Por otro lado ninguna de las disposiciones impedirá:

- que una Parte elabore un informe de actividad científica destinado a la organización administrativa de la cual depende, en la medida en que dicha comunicación no constituya una divulgación según se contempla en las leyes sobre propiedad intelectual
- defender una tesis relacionada con el objeto del Convenio, dicha defensa deberá de organizarse siempre que sea necesario, de tal manera que se garantice, respetando igualmente el reglamento universitario vigente, la confidencialidad de ciertos resultados resultantes de los trabajos efectuados en el marco del Programa.



Artículo 13 - Resultados

13.1. Propiedad de los resultados

Los resultados, susceptibles de patente o no, denominados en lo sucesivo "Resultados", obtenidos en el marco del Convenio, pertenecen en copropiedad a las Partes, denominadas en lo sucesivo "los copropietarios" a partes iguales.

Las entidades chilenas participantes pactarán entre ellas la forma en que se repartirán su parte de la propiedad de los resultados, conforme a la participación que hayan tenido en la obtención de estos.

Luego de solicitarlo, cada Copropietario tiene un derecho, libre y gratuito, al uso de los Resultados de las otras Partes para sus propias necesidades de investigación, y para la investigación llevada a cabo en el marco de la colaboración con terceros, exceptuándose toda utilización, directa y/o indirecta, para fines comerciales.

13-2- Nombramiento de un Administrador para la protección y la valorización de los Resultados

Las Partes designarán entre ellos un administrador (en lo sucesivo denominado "Administrador") quien se hará cargo de garantizar la protección y valorización de los Resultados comunes.

Los candidatos a administrador serán propuestos por las partes y este será elegido por mayoría simple.

Sin embargo, para cada resultado, el CNRS se designará como el mandatario (en adelante denominado "Mandatario"), de conformidad con la reglamentación francesa, y a los acuerdos en vigor entre las instituciones francesas para estar a cargo de la protección y explotación de la parte francesa de copropiedad. El Mandatario representará a todas las instituciones públicas francesas copropietarias.

Asimismo, las instituciones copropietarias chilenas designarán un mandatario, de conformidad con la reglamentación chilena con funciones equivalentes a las establecidas para el mandatario francés.

13-3 Protección de los Resultados mediante patente

Las solicitudes de patentes se presentarán en nombre del conjunto de los Copropietarios, debiendo mencionarse el nombre del o de los inventores.

El Administrador recibirá un mandato expreso de los demás Copropietarios para presentar una o varias solicitudes de patentes y para el mantenimiento de las patentes obtenidas.

El Administrador se encargará de la administración, controlará los trámites relativos a las solicitudes de las patentes, e informará a los otros Copropietarios, sobre la marcha de los trámites y la lista de países extranjeros donde serán presentadas las extensiones.

Si uno de los Copropietarios renunciara expresamente a presentar la solicitud o a mantener en vigor una patente y/o una licencia, deberá informar por escrito a los otros Copropietarios, lo más rápidamente posible y esto, dentro de un plazo máximo de catorce (14) días corridos después de la recepción de una notificación de patente escrita transmitida por el Administrador, sobre una solicitud que se esté tramitando y que hubiera sido presentada por un (de) copropietario (s), para que el o los copropietario(s) puedan solos proseguir el procedimiento

El copropietario que renuncie se comprometerá por otro lado a firmar o a hacer firmar cada uno de los documentos que permitan a los otros Copropietarios convertirse en los únicos propietarios de la o de las patentes en cuestión, los Copropietarios que prosigan con el procedimiento en su nombre y bajo su costo son los únicos beneficiarios de las eventuales rentas resultantes de la explotación de los derechos de la patente en el o en los país(es) en donde el otro copropietario haya renunciado a proseguir con el procedimiento.

El Administrador se hará cargo de los costos de los trámites relacionados con la patente, es decir, su presentación de solicitud, mantenimiento y extensión, en lo sucesivo denominados costos de propiedad intelectual.

13-4. Acciones por falsificación de patente

Toda acción, en particular cuando se trate de una acción por falsificación, o de una acción de reivindicación de patente será iniciada por el Administrador, después de haber consultado y con el acuerdo previo de los demás copropietarios, representados por el Mandatario llegado el caso.

Si uno solo de los Copropietarios decide presentar una demanda, lo hará a su propia iniciativa y solo en su nombre. Las costas procesales correrán a su cargo y las indemnizaciones pronunciadas a su favor le serán atribuidas.

13-5. Valorización de los Resultados

El Administrador recibirá un mandato expreso de los otros Copropietarios para efectuar todas las operaciones de valorización. En particular, negociará los contratos en nombre de la copropiedad con los industriales interesados en explotar y/o desarrollar los Resultados.

El Administrador informará regularmente a los Copropietarios sobre el avance de la prospección y sobre la conclusión de dichas negociaciones. Todo contrato de licencia se firmará por todos los Copropietarios, representados por el Mandatario llegado el caso.

El Administrador, transferirá al conjunto de copropietarios, una cuota de las regalías derivadas de la explotación de los Resultados, previa deducción de una participación para los gastos de valorización efectuados por el Administrador y limitada al 20 % de las dichas regalías. El Mandatario repartirá las respectivas cuotas partes a las otras entidades públicas francesas copropietarias.

13-6: Softwares y Bases de datos

Cada una de las Partes es el único titular de los derechos de los softwares y de las bases de datos desarrollados por ella anteriormente o fuera del marco del LIA.

Los softwares y sus extensiones, como las bases de datos, obtenidos en común pertenecerán conjuntamente a todas las Partes que hayan contribuido a su obtención.

Las Partes gozarán de un derecho gratuito e intransferible de uso de los mismos a fin de satisfacer las necesidades de investigación mencionadas en el presente Convenio. En lo referente a las bases de datos, este derecho de uso se aplica tanto a la estructura como al contenido, e incluye el derecho de extracción.

Respecto a la concesión de los derechos de uso cedidos a terceros de los softwares y bases de datos obtenidos en común, las regalías percibidas como consecuencia de dicha concesión serán repartidas por el Administrador entre las Partes en partes iguales.

TÍTULO V - DISPOSICIONES VARIAS

Artículo 14 - Prórroga - Evaluación

El presente Convenio podrá ser prorrogado por una sólo vez mediante una cláusula adicional o Enmienda.

Las Partes podrán convenir en constituir un comité «ad hoc», principalmente en caso de renovación del LIA, y esto con el fin de evaluar los trabajos del LIA y de emitir recomendaciones sobre su Programa.

Artículo 15 – Adhesión, Rescisión, Retirada y Exclusión

15.1. Adhesión

El Comité de Dirección podrá aceptar nuevos laboratorios pertenecientes a las Partes como miembros del LIA. La adhesión de nuevas Partes al LIA necesitará la firma de una cláusula adicional y será efectiva a partir de la fecha de dicha firma. A condición de obtener el consentimiento unánime del Comité de Dirección, sobre la solicitud de adhesión, las Partes darán mandato al CNRS para la firma de la cláusula adicional de adhesión en nombre de las Partes firmantes del Convenio.

Cada nueva solicitud de adhesión (laboratorio o Parte) deberá de ser comunicada al conjunto de las Partes.

15.2. Terminación

En caso de discrepancia persistente, las Partes podrán decidir de común acuerdo terminar el Convenio con un preaviso de seis (6) meses antes de la fecha en que se desea dar término, por escrito.

15.3. Retiro

Las Partes podrán retirarse del LIA, con un preaviso de seis (6) meses respecto de la fecha de su retiro efectivo, mediante carta certificada. Las modalidades financieras del retiro deberán contar con el acuerdo del Comité de Dirección.

15.4. Exclusión

En caso de participación insuficiente a la realización de los objetivos del LIA o de falta de ejecución de las obligaciones por una de las Partes, dicha Parte podrá ser excluida del LIA tras la decisión unánime del Comité de Dirección, no pudiendo la Parte en cuestión participar en el voto realizado durante el Comité de Dirección.

El Comité de Dirección notificará, mediante carta certificada, a la parte que incurrió en una causa de exclusión, con el objeto de que esta dentro de 15 días corridos contados desde la notificación, presente sus descargos ante el Comité de Dirección, instancia que, contando con todos los antecedentes, resolverá el asunto.

Artículo 16 - Responsabilidad

Cada Parte es responsable, sin posibilidad de recurso contra las otras Partes, salvo en caso de falta grave o intencionada, de la reparación de los daños sufridos en sus propios bienes durante la ejecución del Convenio.

Respecto a los daños causados a los bienes materiales adquiridos por las Partes en el marco del Convenio, las Partes correrán con los costos de reparación o de reemplazo de dichos materiales en proporción a los aportes financieros respectivos que se dedicaron para su adquisición.

Cada Parte es responsable, según las disposiciones de derecho común en la materia, por cualquiera de los daños que pudiesen causar a terceros en el marco de la ejecución del Convenio.



Artículo 17 - Disposiciones finales

Las disposiciones del Título IV seguirán vigentes luego del vencimiento, rescisión, retiro, o exclusión de una de las Partes del Convenio.

Todas las actividades de investigación llevadas a cabo en el seno del LIA serán efectuadas conforme a las leyes, reglamentos y reglas internas aplicables en los países e instituciones en las que se efectúe la investigación.

Las Partes se esforzarán por resolver sus litigios extrajudicialmente mediante negociación directa entre las partes. En caso de fracaso, los desacuerdos se resolverán con arreglo a lo dispuesto en el reglamento de conciliación y arbitraje de la Cámara de Comercio Internacional, mediante la designación de uno o de varios árbitros nombrados de conformidad con dicho reglamento.

El presente Convenio está redactado en dieciseis (16) ejemplares originales, ocho (8) en francés y ocho (8) en español, siendo las dos (2) versiones igualmente auténticas.

Por el Centre National de la Recherche Scientifique

Lugar :
Fecha :

Antoine Petit
Presidente- Director General

Por la Pontificia Universidad Católica de Valparaíso

Lugar :
Fecha :

Claudio Elórtegui Raffo
Rector

Por la Université de Rennes 1

Lugar :
Fecha :

David Alis
Président

Por la Universidad de Chile

Lugar :
Fecha :

Ennio Vivaldi Vejár
Recteur

Por la Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Rennes

Lugar :
Fecha :

Pierre Le Cloirec
Director

Por la Universidad Nacional Andrés Bello

Lugar :
Fecha :

José Rodríguez Pérez
Rector

Por el Institut National des Sciences Appliquées

Lugar :
Fecha :

M'Hamed Drissi
Directeur

Por la Universidad de Santiago de Chile

Lugar :
Fecha :

Juan Manuel Zolezzi Cid
Recteur

PROGRAMA CIENTIFICO

Task	Title
1	Dipolar chromophores and metallo-polymers based on symmetric and asymmetric Schiff base complexes: Optical and catalytic properties
2	Luminescent metal complexes containing phosphine-nitrogen based ligands: towards blue emitters
3	Heterocyclic systems: magnetic and biological studies
4	Electronic and magnetic properties of polyoxometalates based on vanadium or molybdenum containing borate and phosphite units
5	Coordination polymers
6	Design and elaboration of new rhenium cluster based compounds and materials: a combined experimental and theoretical approach
7	Modeling of stable nanosized clusters of group 11 metals and related species
8	Multifunctional materials: physics and chemistry of chalcogenide compounds

Task 1. Dipolar chromophores and metallo-polymers based on symmetric and asymmetric Schiff base complexes: Optical and catalytic properties

J.-R. Hamon (ISCR)

C. Manzur, D. Carrillo (PUCV)

The Schiff base family constitutes a major class of ligands in inorganic chemistry. Schiff bases can be defined as organic compounds possessing C=N bond(s) in the basic skeleton. Their formidable success relies on their high affinity for a great number of metal ions in various oxidation states to form a wide range of stable complexes, and their modular synthesis, which allows for a convenient tuning of both the electronics of the ligand and the steric hindrance around the metal. They found numerous applications in both chemical and biological processes. In the field of functional molecular-based materials, unsymmetrical tetradentate $[M(N_2O_2)]$ type Schiff base complexes that are dipolar molecules bearing an electron donor and an electron acceptor group connected through a π -conjugated spacer, have proven to be efficient chromophores exhibiting large second-order nonlinear optical (NLO) responses controlled by low-energy metal-to-ligand charge transfer (MLCT) excitations. On the other hand, many reports have shown that these Schiff base metal complexes have been used in catalysis, especially in Heck and Suzuki cross coupling carbon-carbon bond formation, oxidation of alkanes, and alkene epoxidation reactions. They show excellent catalytic activities in various reactions at high temperatures and in the presence of moisture.

During the last decade, our interest has been centered in the design and construction of novel $[M(N_2O_2)]$ unsymmetrical Schiff base complexes ($M = Ni, Cu, Zn, Pd$) exhibiting opto-electronic and catalytic properties. The various complexes of tetradentate N_2O_2 Schiff base ligands generated in situ by the template method were synthesized by the reaction of appropriately substituted β -diketone and salicylaldehyde, with a primary diamine and the corresponding metal salts. Enhancement of the NLO properties was achieved on progressing from small molecules to main-chain oligomers and side-chain metallopolymers. However, NLO fading was observed mainly due to lack of adequate conformation and loss of orientation of the chromophores, respectively. Moreover, very recently we have described the first examples of the use of Cu^{II} tetradentate Schiff base complexes as efficient and reusable precatalyst for the regioselective synthesis of 1,4-disubstituted 1,2,3-triazoles via "click" reactions of organic azides and alkynes.

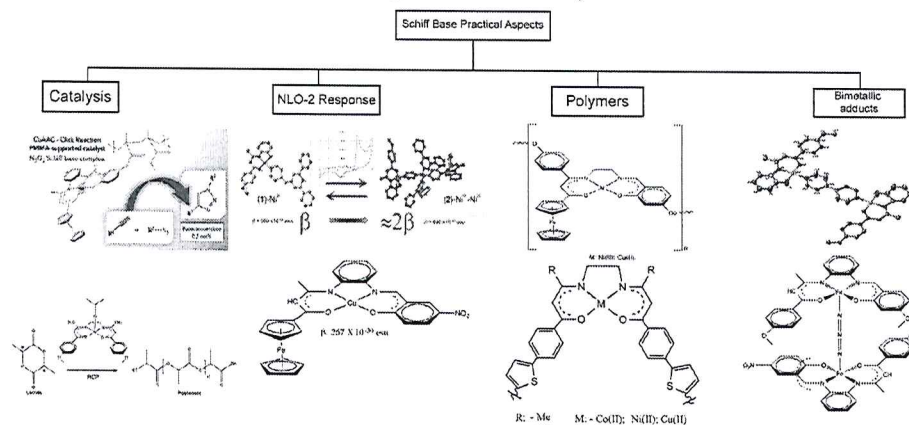


Figure 1. Current research on transition metal complexes containing Schiff base ligands: catalysis, Non-linear optical, push-pull complexes and metallo-polymers.

The aim of this project is to design and synthesize new symmetric and asymmetric Schiff base complexes in order to improve the temporal stability of their NLO response and to perform important and useful catalytic reactions under mild and environmentally friendly conditions.

- Due to the importance of second-order NLO active polymeric films for photonic applications, new Schiff base complexes of the type $[M\{Th-C(CH=C(O)R)=NC_xH_y\}_2]$ will be prepared from β -diketones featuring polymerizable substituents such as thienyl (Th) and their derivatized rings. The formed mononuclear Schiff base compounds are of particular interest for obtaining covalent

coupling of metal complexes to form a polymer backbone because they can be electropolymerized by cyclic voltammetry. The electrodeposited films will then be characterized using appropriate physico-chemical methods and the second harmonic generation (SHG) response determined.

- Development of the preliminary catalytic results obtained with our $[Cu(N_2O_2)]$ Schiff base precatalyst in the field of green chemistry is quite challenging. Such an objective involves the synthesis of new water-soluble Schiff base complexes by



introducing hydrophilic substituents, such as ethylene glycol fragments (TEG or PEG), onto the chelating macrocyclic frameworks, starting from properly TEG- or PEGilated β -diketone and/or salicylaldehyde precursors. Another effective way to achieve this goal is to modify polyoxometalate (POM) anions with functionalized organic reagents to obtain organic-inorganic hybrid materials. In addition, the synergic interactions between organic and inorganic components may be exploited, in particular for the separation and recyclability of the supported catalyst. Employing appropriate transition-metals (Ni, Pd, Cu), the scope and limitation of catalytic C-C bond formation and cycloaddition reactions in aqueous media with the newly formed Schiff base catalysts will be explored.

Syntheses, standard characterization (FTIR, NMR, UV-vis) and electrochemistry will be carried out by the Chilean team. Elemental analyses, HRMS and XRD will be performed at Rennes. The NLO measurements will be determined in collaboration with I. Ledoux-Rak (UMR 8537 ENS Cachan). The subject involving the POM chemistry will need assistance of our LIA colleagues (Task 4, see below). The development of the electropolymerization and analyses of films will be carried out in collaboration with physical chemists, physicists and engineers of both countries. Finally, correlations between molecular structure and physical properties will be studied using DFT and TD-DFT calculations at Rennes (S. Kahlal, J.-Y. Saillard).

Task 2. Luminescent metal complexes containing phosphine-nitrogen based ligands: towards blue emitters

V. Guerschais, J.-R. Hamon (ISCR)

P. Aguirre (UCHile); S. A. Moya (USACH); A. Vega (UNAB)

The expansion of low-cost and more efficient lighting sources based on phosphorescent materials is one of the greatest challenges of our century. In particular, homoleptic and heteroleptic cyclometallated Ir(III) complexes have attracted much attention due to their high phosphorescence quantum yields and short-lived excited states which are crucial properties for emitters employed in light-emitting diodes (OLEDs) or light-emitting electrochemical cells (LEECs). Numerous examples of cationic complexes incorporating a combination of two cyclometallated ligands and one diimine (e.g. bipyridine, phenanthroline or their derivatives) have been reported and the influence of the substitution of the diimine ligand on the electronic excited states described. The emission energy of such heteroleptic complexes is readily fine-tuned by changing the nature of the cyclometallated ligand C^AN and the diimine ligand. Recently, examples of sky-blue and deep-blue phosphorescent Ir(III) complexes bearing biimidazole, bis(NHC), substituted triazole or tetrazole or pyrazolyl-pyridine have been reported, but challenges still remain regarding efficiencies and stabilities of these emitters in devices. The approaches used to widen the HOMO-LUMO gap and shift emission further to the blue are either the use of electron-withdrawing substituents such as F or CF₃ in the metallated aryl ring, which lowers the HOMO, or the replacement of the pyridine moiety of the C^AN ligands by N-heterocyclic rings such as pyrazoles and N-heterocyclic carbenes to raise the LUMO. An alternative way to increase the energy gap is through the use of *non-conjugated* ancillary chelates in place of the diimine.

Heterobidentate P,N-donor ligands represent an important class of ligands that have been applied in various catalytic transformations but they have been scarcely used for the elaboration of luminescent complexes. The use of P^AN-ligands is expected to give rise to a blue-shifted emission thanks to the π -accepting character of the PAr₂ group which will increase the metal-to-ligand charge-transfer (MLCT) energy level.

The chelating ligands L₁-L₁₃ will be prepared by the Chilean team (Figure 2), and the French group will use them for the preparation of luminescent cationic Ir(III) complexes. We will investigate their synthesis and characterization, as well as their electrochemical and photophysical

properties. All complexes will be fully characterized by standard spectroscopic (¹H and ³¹P NMR) and analytical methods (High resolution mass spectra and elemental analyses), and their structures could be confirmed by X-ray crystal structure analyses, which can be carried out in Rennes.

We will examine the effect of the substitution of an "aromatic C^A" (of a quinolyl group) by an "NH" or "CH₂" bridge as well as the length of the bridge between the phosphine and imine ligands of the P^AN ligand on the luminescence characteristics of the resulting complexes. The complexes featuring a *non-conjugated* P^AN bridge ligands are expected to emit in the blue region.

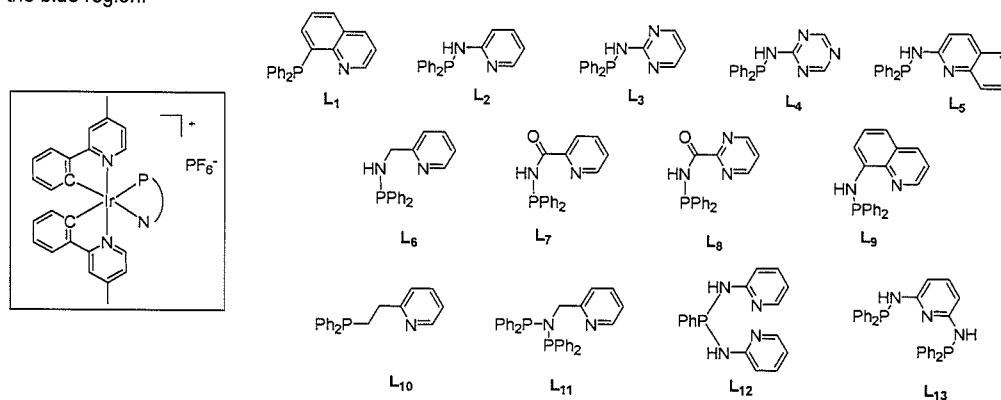


Figure 2. P^AN ligands to be used in the project for the elaboration of Ir(III) complexes

For complexes featuring a P^AN ligand with an "NH" bridge, such as L₂ and L₃, deprotonation will result in the formation of neutral complexes. Such deprotonation reactions with ^tBuOK have already been reported for palladium complexes containing similar chelating ligands. On the other hand, the iridium complex containing the 2-(diphenylphosphinoamino) pyrimidine L₃ could also give rise to a dicationic complex upon protonation of the pyrimidine moieties. We expect thus to tune the optical properties of these complexes upon addition of acid or base (Figure 3).

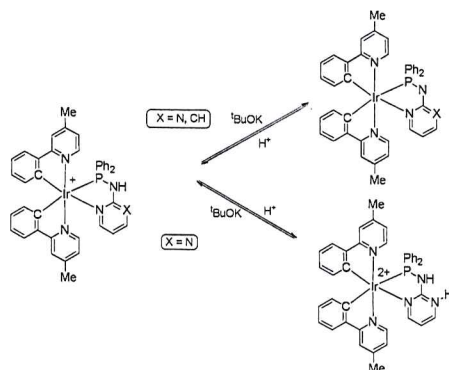


Figure 3. Reactivity of the Ir(III) complexes incorporating the P-NH-N ligand

On the other hand, P[^]N complexes of the third row Re(I) metal will also be investigated. Ligand exchange of the bromine in L₂Re(CO)₃Br is known to be straightforward. This chemical reactivity will be used to introduce triazole and other N-ligands of interest in the coordination sphere of the metal center bearing P[^]N ligand with and without the «NH» unit between the phosphine and imine fragments of the chelating ligands (Figure 4), in order to obtain new potentially luminescent or catalytically active compounds. Coupling experimental and computational approach is expected to get new insights into the elusive nature of ligand effects in the major objective of tuning and predicting the luminescent patterns of the metal tricarbonyl complexes that could be useful in technological applications.

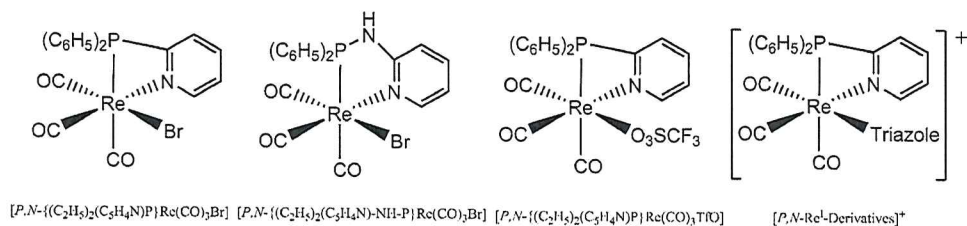


Figure 4. Some P[^]N-Re^I species to be prepared and studied in the project

All complexes will be investigated by means of electrochemistry, absorption and emission spectroscopy. The luminescence properties of the complexes will be studied in fluid solution at room temperature and at 77 K (organic glass). We anticipate that complexes featuring a non-conjugated P[^]N bridge will display blue phosphorescence. The effect of the length of the bridge and the nature of the bridge on the photophysical properties will be also studied. Thus, photomodulation of the luminescence by changing the ancillary P[^]N ligand will be operative.

This project involves the complementary Chilean and French expertises in the fields of P[^]N ligands and luminescent cyclometalated metal complexes, in order to elaborate blue emitters. The subject is multidisciplinary in nature, and the tasks include organic and organometallic synthesis, spectroscopic and structural characterization, photochemical and catalytic studies. Additionally, a detailed knowledge of the electronic structure based on theoretical investigations is required to understand the photophysical properties of the ligands and their complexes. DFT and TD-DFT calculations will be carried out in collaboration with S. Kahlal and J.-Y. Saillard (ISCR).

Task 3. Heterocyclic systems: magnetic and biological studies

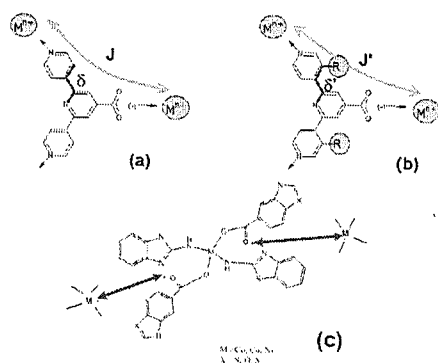
O. Peña, J.-Y. Pivan (ISCR)

Y. Moreno (UNAB); A. M. Atria (UCHile)

Heterocyclic compounds are an important source of ligands, which give rise to different starting materials and a wide range of molecular systems and applications. Among them, N-containing heterocyclic compounds, are of continuing interest, not only as biological active drugs but also as functional materials. In addition, interest for these compounds is mainly due to their use in numerous fields of organic semiconductors, dyes, and electroluminescent material. In this project, we will focus on the synthetic methodology and magnetic properties of new molecular coordination compounds and low dimensional molecular systems supported by N-heterocyclic ligands. The biological activity of the latter species will also be evaluated.

Molecular coordination compounds resulting from complexation of multidentate terpyridine-based building blocks with transition metal and lanthanide ions as paramagnetic centers (Figure 5), are quite innovative in the field of molecular magnetism. They are, indeed, expected to show different behaviors, from paramagnetism to ferromagnetism depending on the oxidation state of the metal center (a mixed valence is an important factor), geometry (e.g., planarity), among others.





Magnetic pathways on M-terpyridine complexes (depending on planarity; a and b) and through carboxylate bridges (c)

Figure 5. Magnetic pathways of compounds containing heterocyclic ligands: (a and b) terpyridine bridge and c) carboxylate bridge

On the other hand, the synthesis of low dimensional molecular systems will involve complexation of transition metal ions (Cu, Ni, Co) with polyfunctional N-heterocyclic carboxylic acids as ligands (Figure 5). The presence of carboxylate functions should generate versatile magnetic couplings due to their different coordination modes (syn-syn, syn-anti, anti-anti bridges). Thus, complexes having a monoatomic syn-anti bridge show weak antiferromagnetic interactions, whereas those with syn-syn bridges will rather exhibit strong interactions. Furthermore, biological properties of such low dimensional molecular systems considers the determination of antimicrobial activity, their possible mechanism of action against bacterial cell (bacteriostatic or bacteriolytic effect), and their toxicity effect on eukaryotic cells and antitumoral activity of the complexes that do not show cytotoxic effect.

The synthesis of nitrogen-containing and heterocyclic ligands and their transition metal/lanthanide complexes as well as their standard spectroscopic and structural characterization will be performed by the two Chilean teams. The French group that has a long term collaboration with the Chilean ones, will center its action on the study, modeling and interpretation of the magnetic properties of molecular and low-dimensional systems. The biological activity will be tested at the UChile.

Task 4. Electronic and magnetic properties of polyoxometalates based on vanadium or molybdenum containing borate and phosphite units

E. Le Fur, L. Le Pollès, T. Bataille, R. Gautier (ISCR)

D. Venegas, W. Canon (USACH)

The chemistry of the solid and solution states, involving polyoxometalates (POMs) has been of great interest for scientists working in materials chemistry. These molecular systems offer great versatility due to their electronic structure, coordination abilities and synthetic plasticity that make them very attractive as ligands or building blocks in inorganic materials. It is possible to find applications of these systems in catalysis, sorption, magnetism and electronics among others.

The structural and magnetic properties of polyoxomolybdates (MoO) and polyoxovanadates (VO) have been studied, but still offer a field full of questions that has been not answered up to the present day, since their electronic structure is still not well understood.

The polyoxovanadates present great plasticity due to the fact that they can be formed by $\{VO_4\}$, $\{VO_5\}$, or $\{VO_6\}$ units. Several polyoxovanadates have been reported with different numbers of vanadium atoms. It is also important to stress that the systematic magnetic studies of these systems are scarce, and that the few ones that are very complete, suggest that this is a field full of challenges that should be explored.

The goal of this task is the electronic characterization of new materials based on the polyoxo-vanadate inorganic lattice with boron and/or phosphite as secondary elements (Figure6). Vanadium is a redox-active element, since it can present oxidation states of five, four or mixed valence states mainly. The presence of several paramagnetic centers bridged by phosphite, oxovanadium and other auxiliary ligands makes them interesting for the study, at the atomic level, of the super-exchange magnetic phenomena. Recent developments in this area showed that the positive charges surrounding the POM may have a strong influence on their magnetic properties. Consequently the design of new boron polyoxovanadate surrounded by NMR sensible species like Na^+ for example would be an objective to have model compounds for the deep investigation of their electronic structure.

In order to obtain a precise characterization of these materials, a synergic use of X-ray diffraction, solid state NMR spectroscopy on quadrupolar nuclei (principally ^{23}Na , ^{11}B , ^{31}P) together with magnetic susceptibility data and DFT calculations (hybrid functional B3LYP and triple- ξ basis set) of electronic structure will be applied, thus permitting a more profound understanding and description of the electronic characteristics of these systems. The different mixed valence states can be obtained using chemical or electrochemical routes, depending on the solubility of the systems.

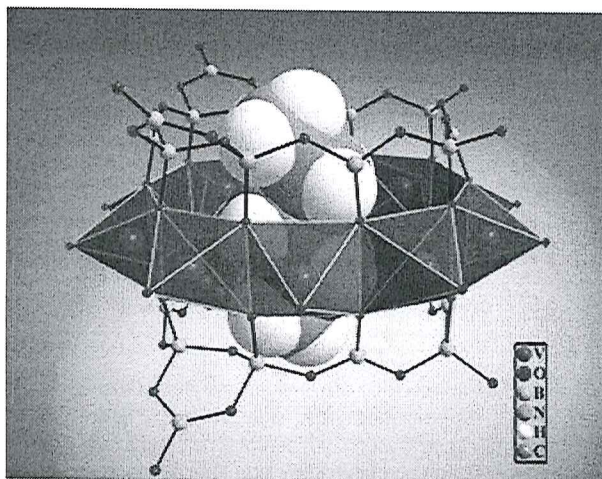


Figure 6. First non-centrosymmetric deca-vanadoborate with borate vacancies assembled around a 1, 3 propanediammonium cation

The synthesis of new materials with magnetic centers and the X-ray diffraction experiments will be done by both the French and Chilean groups, considering that both parts have a long term experience in these fields. The materials will be obtained by either classical procedures or hydrothermal or solvothermal or biphasic syntheses. The solid state NMR experiments will be carried out by the French group, the magneto-structural studies will be performed by the Chilean team, whereas the electrochemical study as well as the theoretical work will be undertaken by the two groups.

Task 5. Coordination polymers

N. Audebrand (ISCR)

V. Paredes (UNAB); E. Spodine (UChile)

The evolution of polymeric materials has seen a dramatic progress during the last century, focused mainly on commodity materials. As this new century begins, similar progress is expected in the area of high-value, active components of technologically advanced devices. The combination of organic and inorganic components into the same molecular backbone has captivated many researchers and probably as consequence of the multiple choices of the components and also of the used synthetic strategies, a wide variety of advanced materials should be obtained. In many cases,

an increase in the structural complexity gives rise to new properties, which cannot be foreseen on the basis of the single constituting moieties.

On the other hand, the fast development of materials science and chemistry inspires researchers to search for new crystalline materials. Thus, in the field of the coordination chemistry, the crystal engineering has also been applied mainly through the design and synthesis of Metal-Organic Materials (MOMs). Inside the MOMs group it is possible to find both discrete as extended (one, two or three dimensional) compounds being the combination of any of these systems also considered, as MOMs and usually called coordination polymers or Metal-Organic Frameworks (MOFs) with potential porosity (Figure 7). This type of compounds is attractive not only by the wide variety of architectures and topologies, but also by the potential applications in catalysis, ion exchange, molecular adsorption, fluorescence, nonlinear optics, and magnetism.

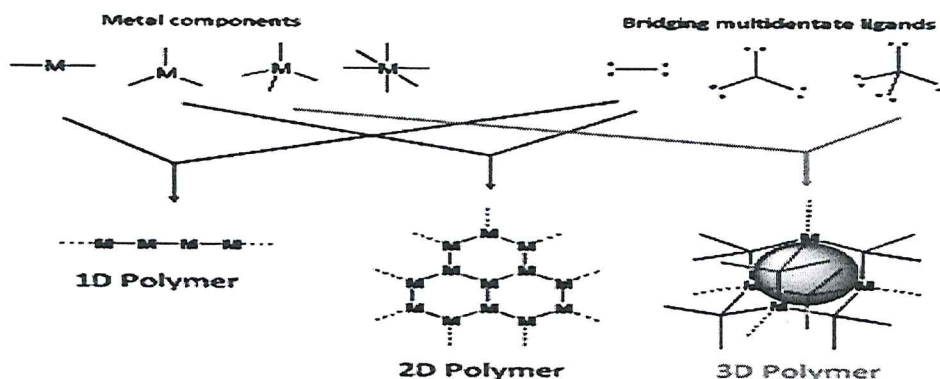


Figure 7. Different dimensionalities of MOMs.

From: <http://www.uow.edu.au/science/chem/academics/UOW078698.html>

From a structural and synthetic point of view, the literature shows that a wide variety of MOMs and MOFs corresponds to coordination polymers which can be obtained by a rational, choosing appropriate metal centers and the organic building blocks, as well as of the reaction pathways. Beyond the wide variety and beautiful topologies which are characteristic of the MOMs, the different properties associated to the components and structural characteristic are obviously relevant. While the presence of the cavities or pores are desired for the applications in gas storage, sensing and separations, the type of metal ions and chemical identity of the organic ligand can be associated with the active catalytic center or optical properties of this material. Moreover, the use of paramagnetic metal ions and the organic linkers are significant in the magnetic properties, and the use of lanthanide ions is interesting not only for their coordination environments, but also for magnetic and luminescent properties. The last, it is necessary to clarify the importance of the constituents, both organic and inorganic, in the different functionalities that a coordination polymer can acquire.



Task 5.1. Polyfunctional MOMs for optics and magnetism (N.Audebrand, V. Paredes)

Taking into account, that the combination of the metal ion or oxocluster and the organic linker provides endless structural possibilities and physical properties for MOMs, we propose that the study and understanding of fundamental aspects of coordination compounds which are forming diverse coordination polymers, and the relationship with the structure (investigated by X-ray single-crystal and powder diffraction and solid state NMR) and physical and chemical properties, are necessary for the design of new materials with predetermined properties such as optical, catalytic, and/or magnetic, among others. A challenging aspect in the project will be the correlation between the structural modifications involved with the sorption properties and reactivity in general, studied by *in situ* X-ray diffraction (as a function of temperature and atmosphere) and the optical/magnetic properties observed *a posteriori*. This research proposal is based on the synthesis of new

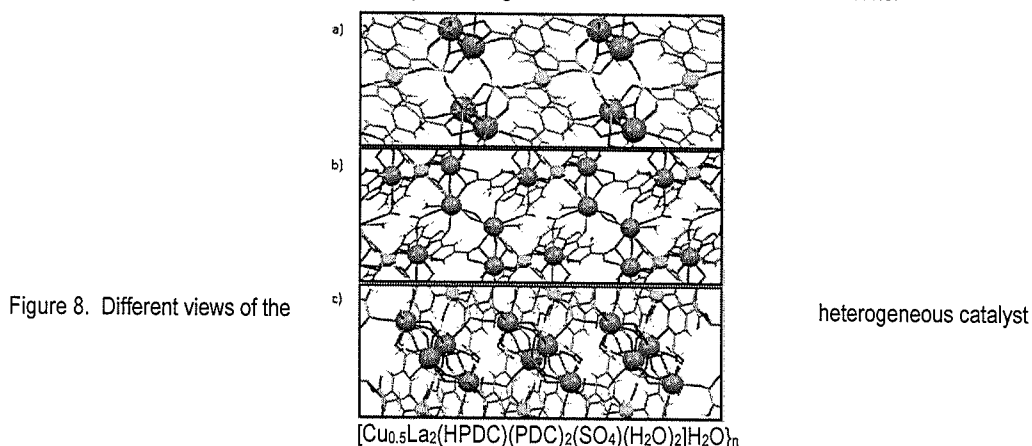
polyfunctional 3d and 4f metal organic frameworks, by conventional synthesis procedures like solvothermal routes, but also by sono- and mecanochemistry, which will be characterized structurally at different temperatures/atmospheres, optically, catalytically and magnetically. These new coordination compounds should be obtained from the assembly of paramagnetic centers belonging to transition metal (3d) ions and lanthanide ions (4f), and multidentate ligands with mixed (O/N) donor atoms as versatile bridging organic ligands. Therefore, the understanding and interpretation of the structural, optical and magnetic interactions as function of the role of different metal building units and solvents in the building of these systems will contribute to the design of new materials.

To reach that aim, project will benefit from complementary equipment and expertise from both partners (synthesis in both teams; luminescence experiments and low temperature single-crystal X-ray diffraction in Chilean team; solid-state NMR, structural analysis from X-ray powder diffraction and *in situ* XRD in French team). Furthermore, the cotutelle Ph.D. thesis of B. Baldo Hurtado is carried out in the frame of this project.

Task 5.2. MOFs as heterogeneous Catalysts (N. Audebrand, E. Spodine)

From an energetic point of view, both homogeneous and heterogeneous catalysts can be considered species that help to rationalize the use of energy, as their goal is to increase the yield of desired products in a chemical reaction, using less demanding energy pathways. Among the heterogeneous catalysts, metal organic frameworks (MOFs), also known as inorganic polymers, have received the attention of the scientific community as interesting systems to be investigated. The MOF materials are assembled through coordinative bonds, hydrogen bonds and π - π stacking, generating frameworks which have an ordered and well defined structure, with a high content of metal centers. In the field of catalysis, MOFs have demonstrated to be good candidates as heterogeneous catalysts. Due to their low solubility, they can be used in a first catalytic cycle and then be easily recovered from the reaction products, offering the possibility of reusability, making them less pollutant and environmentally friendly. Also, another advantage of MOFs is that they have numerous metal centers in a highly ordered distribution, which increases their catalytic capacity since several substrate molecules can bind to the catalyst.

Among the reactions that are catalyzed by MOFs, the oxidation of olefins is a very important reaction to be studied, since the obtained products (epoxides, aldehydes, ketones, diols, among others) find wide applications in organic synthesis, and in the manufacture of perfumery, pharmaceutical products, dyestuff and agrochemicals, all of them of industrial importance. There are many examples in the literature of applications of **copper-based MOFs** in heterogeneous catalysis, including our work showing that a copper(II) MOF, based on the deprotonated benzene tetracarboxylic acid can catalyze the oxidation of cyclohexene and styrene, giving as major products the corresponding epoxides. MOFs based on lanthanide(III) ions have also been used as catalysts in this type of oxidation reactions, showing an excellent catalytic performance reflected in high TON. However, to the best of our knowledge the 3d-4f-MOFs have not been widely studied as catalysts in olefin oxidation reactions. In this way, the Chilean group recently reported a MOF system (Cu, La) based on the pyridindicarboxylic acid as ligand (Figure 8), obtaining excellent results in the oxidation of olefins.



In this complementary research project, The Chilean team will perform the synthesis of the MOFs and the catalytic tests, while the French team will proceed to X-ray powder diffraction structural and microstructural analyses.

Task 6. Design and elaboration of new rhenium cluster based compounds and materials: a combined experimental and theoretical approach

S. Cordier, M. Amela-Cortes, Y. Molard (ISCR)

R. Arratia, D. Paez (UNAB)

This research proposal concerns the elaboration and characterizations of new rhenium cluster compounds. Chile is the first world producer of rhenium metal and has the largest reserves of rhenium minerals. As such, Chilean

government develops research programs devoted to this metal. Combined with chalcogen and halogen atoms, it is known to form metal atom clusters using solid state chemistry techniques. After dissolution, inorganic Re_6 clusters can be functionalized using solution chemistry methods by inorganic or organic ligands (Figure 9). Many strategies have been developed to prepare near infrared emitting liquid crystals and copolymers, extended porous frameworks, theranostic tools and molecular junctions using tailored Re_6 cluster building blocks.

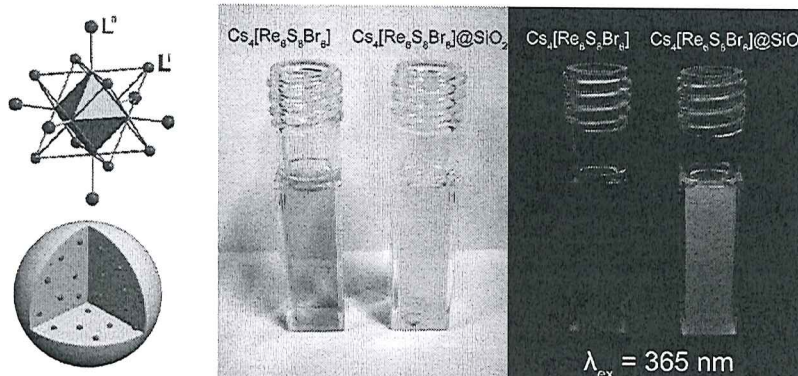


Figure 9. Representation of a $[\text{Re}_6\text{Q}_8\text{L}_6]$ cluster unit and the same cluster (red spots) embedded in a SiO_2 nanoparticles. Image of $[\text{Cs}_4\text{Re}_6\text{S}_8(\text{OH})_6]$ and suspension of $[\text{K}_4\text{Re}_6\text{S}_8(\text{OH})_6]@\text{SiO}_2$ under day light and under UV irradiation.

In this project, the two groups aim at preparing tailor made cluster compounds using a combined experimental and theoretical approach. The project will be divided in two parts:

- The first part will be devoted to the studies of magnetic interaction in extended cluster based polymeric frameworks. They will be obtained by crystallization of hexacyano $[\text{Re}_6\text{Q}_8(\text{CN})_6]^{n-}$ units along with transition elements or organic cations. SQUID and ESR measurements will be performed in Rennes. Calculations of magnetic constants will be made by the Chilean team.
- The second part will be devoted to the preparation of soluble Re_6 cluster units and their integration in nano-suspension and composites microspheres. They will be obtained using $\text{K}_4\text{Re}_6\text{Q}_8(\text{OH})_6$ as starting precursor. A special attempt will be devoted to the preparation of water soluble cluster compounds $\text{A}_4[\text{Re}_6\text{Q}_8(\text{L})_6]$ ($\text{A} = \text{K}$ or NH_4) containing $[\text{Re}_6\text{Q}_8(\text{L})_6]^{4-}$ cluster units. The nature of L will be chosen after modelling of the optical properties by the Chilean group. Afterwards, the synthesis and characterizations of $\text{A}_4[\text{Re}_6\text{Q}_8(\text{L})_6]$ will be performed at the ISCR. They will be further integrated in nano-suspension and in organic matrices to form organic/inorganic microspheres. Biological activities will be tested both in France and Chile.

Note that this work will benefit from the expertise of researchers from the Nikolaev Institute of Inorganic Chemistry of Novosibirsk in the frame of cross actions with the France-Russia LIA

CLUSPOM. The aim of the cross actions between Tasks 4 and 6 of LIA M3 and LIA CLUSPOM is, indeed, to promote new fields of research emerging from the gathering of chemistries of metal atom cluster and poly-oxometallates, developed by researchers involved in those Tasks. ISCR will be the privileged place for exchanges between researchers from France, Chile and Russia on an emergent topic from which could born real breakthroughs in fundamental understanding of clusters and POMs assembling.

Task 7. Modeling of stable nanosized clusters of group 11 metals and related species

J.-Y. Saillard, S. Kahlal (ISCR)

R. Arratia, D. Paez (UNAB)

The aim of this project is to understand the stability (viability) and properties of isolable ligated nanosized clusters of group 11 (incidentally groups 10 and 12) metals: Why do such species exist (or don't exist)? Why do they have the structure they have and the properties associated with? Providing answers to such simple questions is not always straightforward but should contribute rationalizing a chemistry which has been booming during the last decade but for which there is still a lack of conceptualization, In particular with respect to the difference between Cu, Ag and Au.

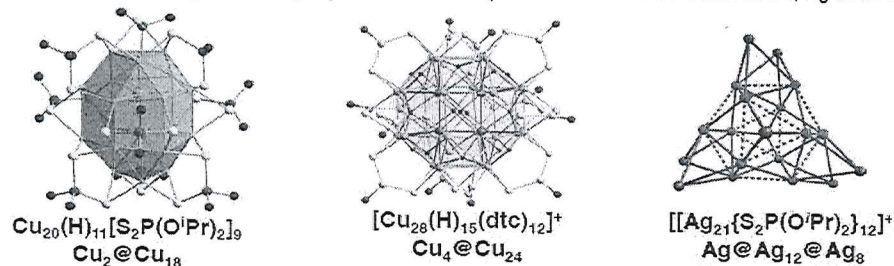


Figure 10. Stable nanosized Cu and Ag clusters stabilized by dichalcogenolate ligands.

The reduction of gold salts (usually by BH_4^-) is known to form, in the presence of anionic ligands such as thiolates, mixed-valent closed-shell clusters named superatoms (with a $[\text{Au}_n]^{x+}$ ($x < n$) kernel). Superatoms are conforming to the spherical jellium electron-counting model. Typical examples are $[\text{Au}_{25}(\text{SR})_{18}]^-$ and $[\text{Au}_{102}(\text{SR})_{44}]^-$. In the case of copper only giant polyhydride Cu(I) clusters, such as $[\text{Cu}_{32}\text{H}_{20}\{\text{S}_2\text{P}(\text{O}^i\text{Pr})_2\}_{12}]$, have been obtained (Figure 10). In fact only one example of Cu superatom, the mixed-valent polyhydride $[\text{Cu}_{25}\text{H}_{22}(\text{PPh}_3)_{12}]^+$, has been published so far. Silver appears to be intermediate between gold and copper with both types of species isolated, such as $[\text{Ag}_{11}(\text{H})(\text{S}_2\text{CNPr}_2)_9]^+$ ($\text{Ag}(\text{I})$) and $[\text{Ag}_{21}\{\text{S}_2\text{P}(\text{O}^i\text{Pr})_2\}_{12}]^+$ ($[\text{Ag}_{21}]^{13+}$) (Figure 10). These differences between the three metals can be tentatively attributed to



their different reduction potentials and/or relativistic effects, but kinetic factors associated with particular reaction conditions are not to be excluded.

In this project we will modelize various nanosized species by the means of DFT calculations and compare their stability and bonding for similar structures of various sizes and electron richness (including polyhydride systems). Our goal is to provide a better understanding of the three different chemistries and also to rationalize the properties (in particular optical, electrochemical and chemical) of the investigated compounds, owing to their potential applications in optoelectronic devices, catalysis, hydrogen storage...). Both teams in Rennes and Santiago are experts in cluster electronic structure. Moreover, they are complementary since the group in Rennes has been focused this last decade on copper and silver polyhydrides and superatoms, whereas the group in Santiago is specialized on relativistic effects, an expertise necessary for tackling the gold (and silver?) side of the project. Furthermore, the co-tutelle Ph.D. thesis of F. Gam is carried out within the frame of this project. Prof. A. Muñoz (U Autonoma de Chile) will also be involved in the collaborative work.

Task 8. Multifunctional materials : physics and chemistry of chalcogenide compounds

O. Peña (ISCR)

V. Manriquez, A. Galdamez, P. Valencia, S. Morris (UCHile)

In the present project, interest will be focused on the synthetic methodology and potential applications of new compounds with magnetic and/or electrical properties (Figure 11). The research topics include (i) magnetic properties of the S- and Se-based spinels, (ii) adamantane and CZTS solar cell materials, and (iii) lead-free thermoelectric materials.

- The magnetic chalcogenides of spinel type-structure are quite interesting because their structural, magnetic and electronic properties can be easily monitored by slight doping. Two or more interacting magnetic networks may exist, giving place to complex magnetic phase diagrams, going from long-range order to magnetically frustrated states. We propose herein a thorough study of the spinel-type CuCr_2Se_4 phase partially substituted at the Cr site, $\text{Cu}(\text{Cr},\text{M})_2\text{Se}_4$ ($\text{M} = \text{Zr}, \text{Sn}, \text{In}, \text{Ir}$), our main goal being to investigate the influence on the magnetic, electrical and crystallographic properties of the parent compound. This subject will be carried out in collaboration with Prof. P. Barahona (UCM, Talca).

- The materials of the type $\text{Cu}_2\text{M}^{\text{II}}\text{M}^{\text{IV}}\text{S}_4$ ($\text{M}^{\text{II}} = \text{Zn}, \text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}$; $\text{M}^{\text{IV}} = \text{Si}, \text{Sn}$) have large potentials as solar cells absorbents and as components in nonlinear optical devices. Some solid solutions of this family, in which presence of Fe^{+2} or Mn^{+2} ions leads to important magnetic exchange interactions, were recently reported by us and their importance in solid state chemistry highlighted. The aim of this proposal is the synthesis and characterization of chalcogenide compounds $\text{Cu}_2\text{M}^{\text{II}}\text{M}^{\text{IV}}\text{Se}_4$ ($\text{M}^{\text{IV}} = \text{Si}, \text{Ge}$) derived from a Kesterite-stannite crystal-type structure.

- The third aspect of this project is related to the chemistry of lead-free thermoelectric materials. This new subject deals with multicomponent chalcogenides with thermoelectric interest, namely compounds of distorted NaCl-type structure, $\text{AgSn}_m(\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x)\text{Se}_{2+m}$ and $\text{AgSn}_m\text{M}(\text{Se}_{1-x}\text{S}_x)_{2+m}$, where $\text{M} = \text{Bi}, \text{Sb}$. These materials have a great interest in the field of energy sources and multiferroic properties.

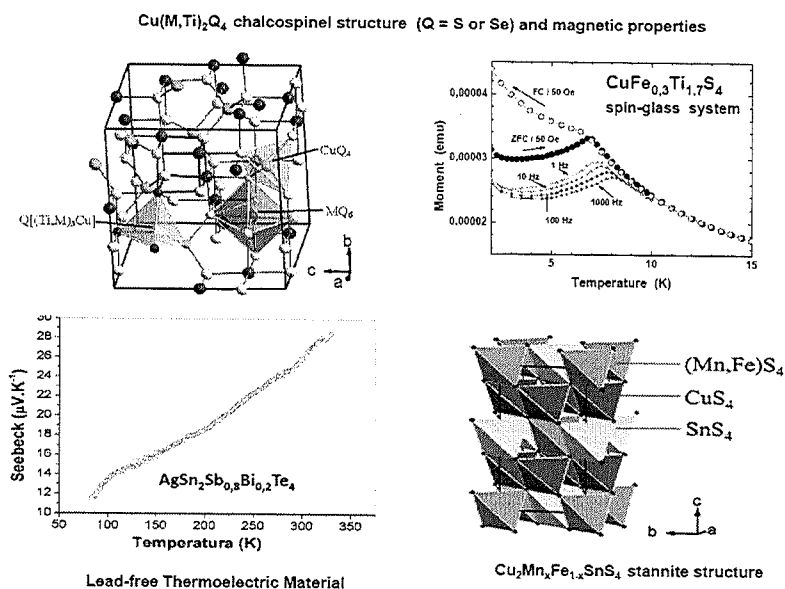


Figure 11. Generic multifunctional chalcogenide compounds, magnetic and thermoelectric properties

In this complementary research project, The Chilean team will perform the synthesis (solid state and vapor transport) and conventional crystallochemical characterization (powder XRD, AAS, TDA, TGA, IR, Raman) whereas the French group will mainly have in charge the structural (single-crystal), microstructural, transport properties and magnetic characterization of materials synthesized in Chile.

ANEXO 2:

COMPOSICIÓN DE LOS LABORATORIOS/EQUIPOS AL 1° DE ENERO DE 2018

Laboratorios Franceses

Laboratorio	Personal	Cargo	Tiempo dedicación LIA %
Organométalliques: Matériaux et Catalyse (OMC)	Jean-René HAMON	DR	50
	Véronique GUERCHAIS	DR	10
	Olivier CADOR	PU	10
	Paul HAMON	IE	10
	Muriel ESCADEILLAS	TCE	10
Chimie du Solide et Matériaux (CSM)	Stéphane CORDIER	DR	10
	Octavio PENA	DR.Em	50
	Nathalie AUDEBRAND	Pu	25
	Eric LE FUR	MC	15
	Laurent LE POLLES	MC	10
	Yann MOLARD	MC	5
	Thierry BATAILLE	CR	10
	Jean-Yves PIVAN	PU	30
	Maria AMELA-CORTES	MC	10
	Thierry GUIZOUARN	IE	10
Chimie Théorique Inorganique (CTI)	Régis GAUTIER	PU	10
	Samia KAHLAL	MC	20
	Jean-Yves SAILLARD	Pu.Em	25

Laboratorios Chilenos

Organismo Firmante	Laboratorio	Personal	Cargo	Tiempo dedicación LIA %
PUCV	Fac. Ciencias	Carolina MANZUR	Prof. Titulaire	30
		David CARRILLO	Prof. Emérite	15
		Juan Pablo SOTO	Prof. Associé	10
		Mauricio FUENTEALBA	Prof. Associé	15
UChile	Fac. Ciencias químicas y farmacéuticas	Pedro AGUIRRE	Prof. Titulaire	15
		Evgenia SPODINE	Prof. Titulaire	15
		Ana María ATRIA	Prof. Associé	10
	Fac. de Ciencias	Victor MANRIQUEZ	Prof. Titulaire	15
		Antonio GALDAMEZ	Prof. Assistant	15
		Paulina VALENCIA	Post-doctorante	25
UNAB	Fac. Ecología y Recursos Naturales	Andrés VEGA	Prof. Associé	10
		Veronica PAREDES	Prof. Assistant	15
		Yanko MORENO	prof. associé	15
		Ramiro ARRATIA	Prof. Titulaire	10
		Dayan PAEZ	Prof. Associé	10
USACH	Fac. Química y Biología	Diego VENEGAS	Prof. titulaire	15
		Sergio A. MOYA	Prof. Titulaire	10
		Walter CANON	Prof. Assistant	20



ANEXO 3

PRESUPUESTO PREVISIONAL CONSOLIDADO DEL LIA PARA EL PRIMER AÑO

Pays	Institution	Contribution financière		Montant (€) (si possible la répartition détaillée du budget)	Autre apport Ex : infrastructure	Type de personnel	Equivalent temps plein (ETP) OU personne-mois
France	CNRS	X Fonctionnement X Matériel X Mobilité	<input type="checkbox"/> Autre (préciser)	15 k€		X Chercheur	2
						<input type="checkbox"/> Post-doctorant	
						<input type="checkbox"/> Doctorant	
						<input type="checkbox"/> Support	
	UR 1	X Fonctionnement X Matériel X Mobilité	<input type="checkbox"/> Autre (préciser) Stage Doctorat Professeur invité	6 k€		X Chercheur	1
						<input type="checkbox"/> Post-doctorant	
						<input type="checkbox"/> Doctorant	
						<input type="checkbox"/> Support	
	ENSCR	X Fonctionnement X Matériel X Mobilité	<input type="checkbox"/> Autre (préciser) Stage Doctorat Professeur invité	2 k€		X Chercheur	0.3
						<input type="checkbox"/> Post-doctorant	
						<input type="checkbox"/> Doctorant	
						<input type="checkbox"/> Support	
INSA	<input type="checkbox"/> Fonctionnement <input type="checkbox"/> Matériel <input type="checkbox"/> Mobilité	<input type="checkbox"/> Autre (préciser) Stage Doctorat Professeur invité			<input type="checkbox"/> Chercheur		
					<input type="checkbox"/> Post-doctorant		
					<input type="checkbox"/> Doctorant		
					<input type="checkbox"/> Support		
Chili	PUCV	X Fonctionnement X Matériel Mobilité	<input type="checkbox"/> Autre (préciser)	6 k€	infrastructure	X Chercheur	0.75
						<input type="checkbox"/> Post-doctorant	
						X Doctorant	1
						<input type="checkbox"/> Support	
	UCHILE	X Fonctionnement X Matériel <input type="checkbox"/> Mobilité	<input type="checkbox"/> Autre (préciser)	6 k€	infrastructure	X Chercheur	0.5
						<input type="checkbox"/> Post-doctorant	
						X Doctorant	1
						<input type="checkbox"/> Support	
UNAB	X Fonctionnement X Matériel	<input type="checkbox"/> Autre	10 k€	infrastr	X Chercheur	2	

		<input type="checkbox"/> Mobilité	(préciser)		ucture	<input type="checkbox"/> Post-doctorant	2
						<input checked="" type="checkbox"/> Doctorant	
						<input type="checkbox"/> Support	
	USACH	<input checked="" type="checkbox"/> Fonctionnement <input checked="" type="checkbox"/> Matériel <input type="checkbox"/> Mobilité	<input type="checkbox"/> Autre (préciser)	3 k€	infrastr ucture	<input checked="" type="checkbox"/> Chercheur	0.5
						<input type="checkbox"/> Post-doctorant	1
						<input checked="" type="checkbox"/> Doctorant	
						<input type="checkbox"/> Support	

ANÓTESE Y COMUNÍQUESE,

Dr. JUAN MANUEL ZOLEZZI CID, Rector

Lo que transcribo a usted para su conocimiento.
Saluda a usted.



GUSTAVO ROBLES LABARCA
SECRETARIO GENERAL

JMZ/AB/GDLB
IP: 80045

DISTRIBUCIÓN:

- 1 Rectoría
- 1 Contraloría Universitaria
- 1 Dirección de Relaciones Interuniversitarias e Internacionales
- 1 Oficina de Partes
- 1 Archivo Central



01227 888300