

Memòria de les activitats de recerca del  
departament de  
Química Física i Inorgànica  
**2008**

Facultat de Química  
Universitat Rovira i Virgili



Mèmorla Recerca DQFI  
2008

Índex

1. El Departament en dades	4
2. Estructura personal	7
3. Descripció de la recerca	7
3.1. Grups de recerca	7
3.2. Línies de recerca	7
3.3. Centres d'innovació i participació en xarxes	8
3.4. Estructures de recerca	8
4. Projectes i contractes actius	9
5. Resultats de recerca	20
5.1. Publicacions	20
5.2. Patents	27
5.3. Organització de congressos	28
5.4. Participació en congressos	28
6. Estadades de professors visitants	33
7. Activitats de formació	34
7.1. Post-Grau i formació permanent	34
7.2. Tesis Doctorals	34
8. Altres activitats	35
8.1. Conferències i seminaris	35
8.2. Divulgació	36

## 1. EL DEPARTAMENT EN DADES

Campus Sescelades – Marcel·lí Domingo, s/n – 43007 Tarragona  
Tel i fax 977 558 137 – 977 559 563  
[ddqfi@urv.cat](mailto:ddqfi@urv.cat)

El Departament de Química Física i Inorgànica (DQFI) agrupa els professors de les àrees de Química Física, Química Inorgànica, Física Aplicada i Cristal·lografia i Mineralogia.

### EL DEPARTAMENT AMB DADES 2008

PDI permanent	22
PDI Lector	2
PDI Associats	11
PDI postdoc	6
PDI predoctoral	35
PSR	4
PAS	5
EJC	29,64

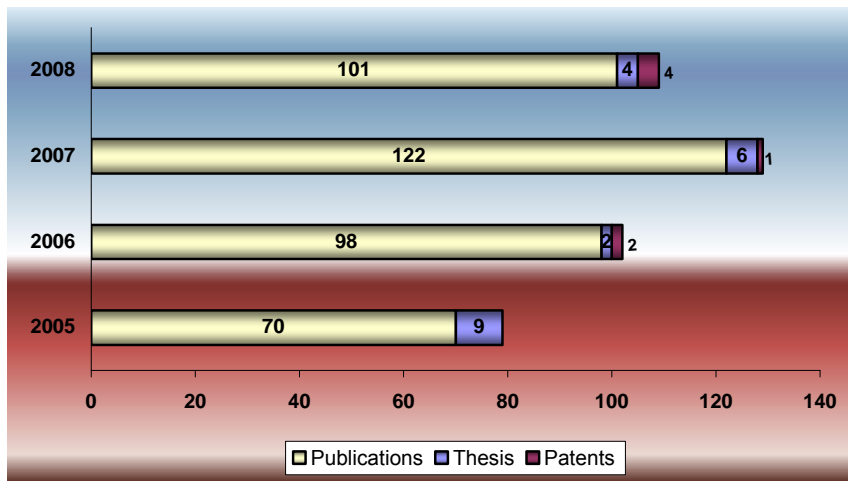
### LA RECERCA AMB DADES 2008

Grups de recerca	6
Centres d'Innovació	2
Estructures de recerca	1
Projectes públics	30
Finançament públic (€)	1.028.091,0
Contractes empreses	17
Finançament per contractes (€)	78.368,00
Finançament /EJC (€)	37329,93

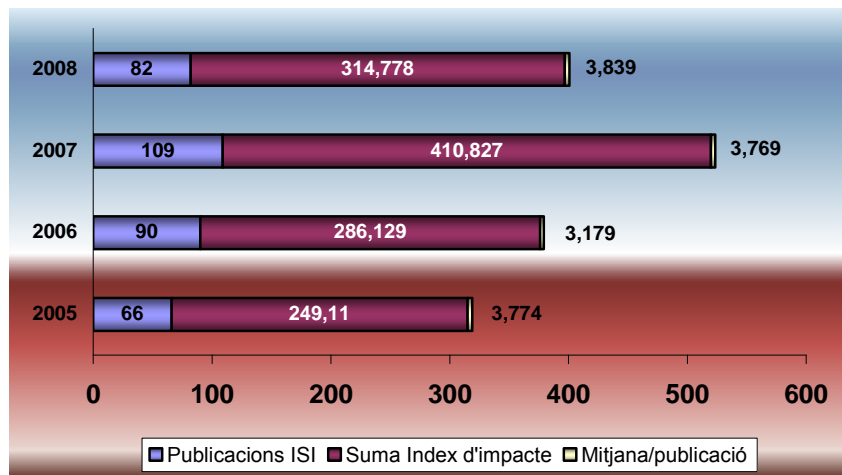
Tesis llegendes	4
Articles ISI	82
Capítols de llibres	4
Patents	2
Suma Index Impacte	314,778
Index d'Impacte/article	3,839
Articles ISI/EJC	2,77
Articles ISI/EJC (mitjana URV)	0,50

Aproximadament el 60% dels articles es publiquen en revistes que es troben al primer quartil de la seva categoria.

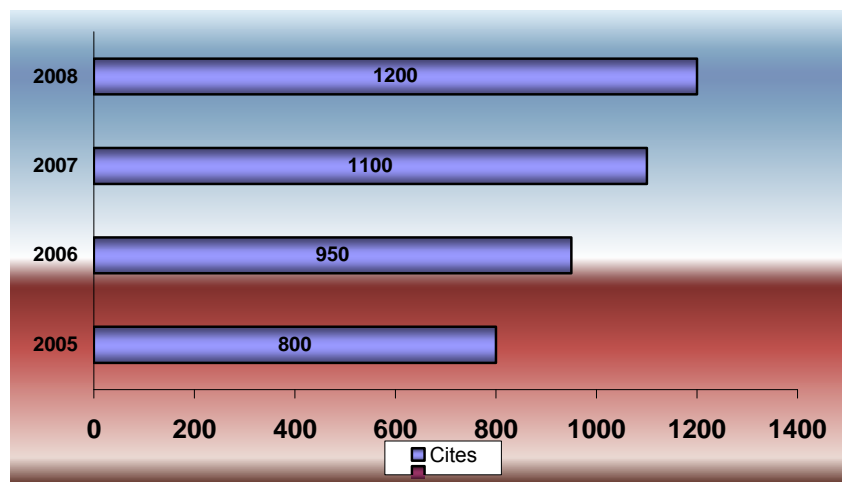
### Evolució de la recerca 2005-2008



### Evolució de l'Index d'impacte



### Evolució del nombre de cites



## Publicacions

Revistes	n. public.	Index d'impact
Chemical Reviews	1	23,592
Angew. Chem. Int	2	10,031
Proceedings of the National Academy of Science of the USA	1	9,598
Journal of the American Chemical Society	4	7,885
Chemistry: A European Journal	4	5,330
Chemical Communications	3	5,140
Green Chemistry	1	4,836
Journal of Computational Chemistry	1	4,300
Inorganic Chemistry	1	4,123
Journal of Physical Chemistry B	2	4,086
Curr. Org. Chem	1	3,961
Organometallics	2	3,833
Optics Letters	3	3,711
Optics Express	2	3,709
Acta Materialia	1	3,624
Chemphyschem	1	3,502
Journal of Physical Chemistry C	1	3,396
Dalton Transactions	5	3,212
Physical Review B	1	3,172
Journal of Chemical Physics	1	3,044
Journal of Physical Chemistry A	1	2,918
Journal of Molecular Catalysis A	2	2,707
Tetrahedron Letters	1	2,615
European Journal of Inorganic Chemistry	4	2,597
Theoretical Chemistry Accounts	1	2,537
Microporous and Mesoporous Materials	1	2,210
Chemical Physics Letters	3	2,207
Journal of Applied Physics	1	2,171
Journal of Organometallic Chemistry	2	2,168
Acta Crystallographica Section B	1	2,163
Journal of Crystal Growth	2	1,950
American Institute of Aeronautics and Astronautics, AIAA, J.	1	1,930
Laser Physics Letters	1	1,918
Journal of Materials Research	1	1,916
Journal of Physics-Condensed Matter	2	1,886
Catalysis Letters	2	1,883
Polyhedron	1	1,756
Industrial & Engineering Chemistry Research	2	1,749
Surface Science	1	1,731
Inorganica Chimica Acta	1	1,713
Applied Optics	1	1,701
Journal of Molecular Structure	1	1,486
Journal of Alloys and Compounds	1	1,455
Magnetic Resonance in Chemistry	1	1,434
Materials Science and Engineering B	3	1,330
Microgravity Science and Technology	1	1,050
Pharmachem	1	

## **2.- Estructura personal**

El Departament de Química Física i Inorgànica està integrat per:

- Catedràtics d'universitat: 6
- Professors titulars d'universitat: 13
- Catedràtics d'escola universitària: 2
- Professors Lectors: 2
- Personal Investigador vinculat: 3
- Personal investigador Ramón y Cajal: 4
- Personal investigador ICREA: 1
- Personal investigador Juan de la Cierva: 2
- Professors associats doctors: 5
- Professors associats no doctors: 6
- Becaris pre-doctorals:
  - o FPI Ministeri: 7
  - o FPI Generalitat: 3
  - o URV: 18
- Doctorands: 7
- Personal de suport de la recerca: 3
- Tècnics Informàtics: 2
- Tècnics de Laboratori: 2
- Administratius: 2
- Col·laboradors. Becaris PEQ: 2
- Becaris Iniciació Recerca 3

La Dra. Carmen Claver Cabrero i la Dra. Montserrat Diéguez tenen la distinció de la Generalitat de Catalunya per a la Promoció de la Recerca Universitària. El Dr. Francesc Díaz González, la Dra. Carmen Claver i la Dra. Rosa Caballol són Professors Distingits de la URV.

## **3.- Descripció de la recerca**

### **3.1.- Grups de recerca**

- Catàlisi Heterogènia (CATHETER)
- Física i Cristal·lografia de Materials (FICMA)
- Física i Cristal·lografia de Nanomaterials (FICNA)
- Física dels entorns microgravitatoris (FEM)
- Organometàl·lics i Catàlisi Homogènia (OMICH)
- Química Quàntica (QQ)

### **3.2.- Línies de recerca**

#### Catàlisi Heterogènia

- Preparació i modificació de materials, zeolites, argiles, apilarats i hidrotalcites, amb tecnologia microones.
- Hidrogenació catalítica d'òxid d'estirè per obtenir 2-feniletanol (aroma de roses).
- Isomerització catalítica d' àcid linoleic per a l'obtenció de CLAs d'interès nutricional.
- Transformació catalítica de la glicerina a productes de valor afegit.

#### Física i Cristal·lografia de Materials i Nanomaterials

- Materials làser. Obtenció i caracterització.
- Materials d'òptica no-lineal. Obtenció i caracterització.
- Desenvolupament de nous làsers d'estat sòlid. Obtenció i caracterització.
- Micro i nanoestructuració de materials fotònics. Obtenció i caracterització.

#### Física dels entorns microgravitatoris

- Fluids mono/multifàsics d'interès tecnològic. Sistemes de propulsió i biològics autosostinguts.
- Solidificació direccional virtual. Mètodes de Bridgman i Zona Flotant.
- Dinàmica i formació d'estructures en sistemes extensos molt lluny de l'equilibri. Efecte de les fluctuacions en aquest tipus de sistemes.

#### Organometàl·lics i Catàlisi Homogènia

- Catàlisi enantioselectiva Disseny i síntesi de lligands quirals. Optimització de processos enantioselectius.
- Desenvolupament de nous catalitzadors quirals mitjançant química combinatòria.
- Medis de reacció alternatius en reaccions de carbonilació i hidrogenació.
- Síntesi d'isocianats: carbonilació oxidant d'anilina amb catalitzadors de cobalt.
- Estabilització de nanopartícules amb lligands orgànics. Aplicació en processos catalítics. Nanocatàlisi.
- Síntesi de compostos organofluorats amb catàlisis organoborada.

#### Química Quàntica

- Desenvolupament de mètodes específics d'interacció de configuracions.
- Propietats governades pels estats excitats. Materials magnètics: molècules, agregats i sòlids
- Estudi de mecanismes de reaccions fotoquímiques.
- Estudi de sistemes d'alta nuclearitat. Polioxometal·lats, metaloful·lerens i complexos en alt estat d'oxidació.
- Quimiadsorció i espectroscòpia de molècules adsorbides.
- Modelatge de processos catalítics homogenis i de complexos organometàl·lics.
- Modelatge de processos catalítics heterogenis.
- Modelatge de sistemes en l'escala nanoscòpica. Creixement de nanofilaments.

### **3.3.-Centres d' Innovació i participació en xarxes**

Participació en la xarxa de Centres de Suport a la Innovació Tecnològica del CIDEM:

- **AMIC:** Aplicacions Mediambientals i Industrials de la Catàlisi.
- **TecaT:** Centre d'Innovació Tecnològica en Desenvolupament de Catalitzadors per a Processos Sostenibles.

També es participa en les següents xarxes:

- Xarxa Interuniversitària " Nanocatàlisis" entre el Govern Català i el CNRS.
- Xarxa de referència d'R+D+I en Química Teòrica i Computacional. Contracte programa entre el Departament d'Innovació, Universitats i Empresa i la Fundació Bosch i Gimpera, hi participen 17 grups consolidats de Catalunya.
- Xarxa Interuniversitària "Materials i Dispositius Fotònics". Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR).
- Xarxa temàtica "Atomic Transport in Liquid Alloys and Semiconductors, ATLAS" de la European Space Agency.

### **3.4.-Estructures de recerca**

Enginyeria de Materials i Micro-nano Sistemes (EmaS), format per sis grups de recerca de diferents departaments de la URV.

#### **4.-Projectes i contractes actius**

Tots els grups de recerca del departament compten amb finançament del programa Suport de Grups Consolidats del Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació. Durant l'any 2008 han estat vigents:

- Projectes d'investigació d'àmbit estatal (PN I+D+N, Consolider)
- Ajuts per a grups de Recerca de Qualitat Generalitat de Catalunya
- Accions de cooperació internacional (Accions Integrades, Accions de Cooperació)
- Xarxes temàtiques
- Programes d'infraestructura
- Projectes amb ICIQ
- PGIR
- Programes PETRI
- Contractes amb empreses

#### **Projectes de finançament públic**

● <b>Títol</b>	Uso de la tecnología microondas para la preparación y modificación de esmectitas y zeolitas con propiedades de interés
<b>Participació/Grup</b>	Maria Pilar Salagre Carnero (investigador principal) Yolanda Cesteros (col·laboradora) CATHETER
<b>Organisme</b>	MEC- Ministerio de Educacion y ciencia
<b>Programa</b>	NCTQ - Programa Nacional de Ciencias y Tecnologías Químicas
<b>Codi oficial</b>	CTQ2005-02384/PPQ
<b>Data d'inici</b>	31/12/2005
<b>Anys de durada</b>	3

● <b>Títol</b>	Nuevos protocolos de síntesis de catalizadores con propiedades básicas controladas para química verde: Aplicación en reacciones de condensación aldólica empleando reactores en continuo y discontinuo.
<b>Participació/Grup</b>	Yolanda Cesteros (Col·laboradora) CATHETER
<b>Organisme</b>	MEDU - Ministerio de Educación y Ciencia
<b>Programa</b>	NCTQ - Programa Nacional de Ciencias y Tecnologías Químicas
<b>Codi oficial</b>	CTQ2006-08196/ PPQ
<b>Data d'inici</b>	01/10/2006
<b>Anys de durada</b>	3

● <b>Títol</b>	Nuevos desarrollos de materiales cristalinos laser y no-lineales para la demanda actual de las tecnologías fotónicas
<b>Participació/Grup</b>	Francisco Manuel Díaz González (investigador principal) Massons, J.; Gavaldà, J.; Solé, R.M.; Pujol, M.C., Aguiló, M. (col·laboradors) FICMA/FICNA
<b>Tipus de contracte</b>	NNMA - Programa Nacional de Materiales
<b>Organisme</b>	MEDU - Ministerio de Educación y Ciencia
<b>Programa</b>	NMAE - Programa Nacional de Materiales
<b>Codi oficial</b>	MAT2005-06354-C03-02
<b>Data d'inici</b>	31/12/2005
<b>Anys de durada</b>	3

<b>● Títol</b>	Desarrollo de un nuevo laser de estado sólido basado en capa delgada monocristalina de tungstato dobles
<b>Participació/Grup</b>	Francisco Manuel Díaz González (investigador principal) Solé, R.M.; Pujol, M.C., Aguiló, M. (col·laboradors) FICMA/FICNA
<b>Organisme</b>	MEDU - Ministerio de Educación y Ciencia
<b>Programa</b>	PTMU - Prioridades temáticas multidisciplinares
<b>Codi oficial</b>	CIT-020400-2005-14
<b>Data d'inici</b>	01/01/2005
<b>Anys de durada</b>	3

<b>● Títol</b>	Síntesis y caracterización óptica de los nuevos materiales $M\text{Ln}(\text{PO}_3)_4$ , $M\text{LnP}_4\text{O}_{12}$ , y $\text{LnP}_5\text{O}_{14}$ (donde $M=\text{Li, K, Na y Rb}$ ); $\text{Ln}=\text{Y}$ y elementos lantánidos
<b>Participació/Grup</b>	Magdalena Aguiló Díaz (investigador principal) Díaz, F., Solé, R.M.; Pujol Baiges, M.C. Carvajal, J.J., Mateos, X (col·laboradors) FICMA/FICNA
<b>Organisme</b>	Agencia Espanyola de Cooperación Internacional.
<b>Programa</b>	Ayudas de Cooperación Internacional
<b>Codi oficial</b>	A/012814/07
<b>Data d'inici</b>	15/12/2007
<b>Anys de durada</b>	1

<b>● Títol</b>	Diseño de catalizadores para una Química sostenible: una aproximación integrada (INTECAT).
<b>Participació/Grup</b>	Maria del Carmen Claver Cabrero (investigador principal) Aurora Ruiz, Elena Fernández, Montserrat Diéguez, Oscar Pàmies, Núria Ruiz, Anna M. Masdeu, Arantxa Orejón, Cyril Godard (col·laborador) OMICH
<b>Organisme</b>	MEC
<b>Programa</b>	CONSOLIDER INGENIO
<b>Codi oficial</b>	CSD2006-0003
<b>Data d'inici</b>	31/12/2006
<b>Anys de durada</b>	3

<b>● Títol</b>	Nuevas estrategias en catalisis asimétrica con metales de transición (NECAMT)
<b>Participació/Grup</b>	Maria del Carmen Claver Cabrero (investigador principal) Montserrat Dieguez, Aurora Ruiz, Oscar Pàmies (col·laboradors) OMICH
<b>Organisme</b>	MEDU - Ministerio de Educación y Ciencia
<b>Programa</b>	NCTQ - Programa Nacional de Ciencias y Tecnologías Químicas
<b>Codi oficial</b>	CTQ2007-62288-BQU
<b>Data d'inici</b>	01/10/2007
<b>Anys de durada</b>	3

<b>● Títol</b>	Reacciones de carbonilación en disolventes de bajo impacto ambiental
<b>Participació/Grup</b>	Anna Maria Masdeu Bultó (investigador principal) Núria Ruiz i Arantxa Orejón (col·laboradores) OMICH
<b>Organisme</b>	MCYT - Ministerio de Ciencia y Tecnología
<b>Programa</b>	NPPQ - Programa Nacional de Procesos y Productos Químicos
<b>Codi oficial</b>	CTQ2004-03831
<b>Data d'inici</b>	13/12/2004
<b>Anys de durada</b>	4

● <b>Títol</b>	Diseño de catalizadores metálicos para reacciones de hidrobromación y dibromación asimétricas: Funcionalización selectiva de moléculas objetivo
<b>Participació/Grup</b>	Maria Elena Fernández Gutierrez (investigador principal) OMICH
<b>Organisme</b>	MEDU - Ministerio de Educación y Ciencia
<b>Programa</b>	NCTQ - Programa Nacional de Ciencias y Tecnologías Químicas
<b>Codi oficial</b>	CTQ2007-60442-BQU
<b>Data d'inici</b>	01/10/2007
<b>Anys de durada</b>	3

● <b>Títol</b>	Uso del dióxido de carbono en reacciones de carbonilación, hidrogenación y copolimerización
<b>Participació/Grup</b>	Anna Maria Masdeu Bultó (investigador principal) Núria Ruiz, Arantxa Orejón (col-laboradores) OMICH
<b>Organisme</b>	MEDU - Ministerio de Educación y Ciencia
<b>Programa</b>	NCTQ - Programa Nacional de Ciencias y Tecnologías Químicas
<b>Codi oficial</b>	CTQ2007-63510-PPQ
<b>Data d'inici</b>	01/12/2007
<b>Anys de durada</b>	3

● <b>Títol</b>	Modelización ab initio a escala molecular, nanoscópica y macroscópica de materiales de interés tecnológico
<b>Participació/Grup</b>	Rosa Caballol Lorenzo (investigador principal) Josep Manel Ricart, Joan Igual, Anna Clotet, Mar Reguero, Coen de Graaf (col-laboradors) QQ
<b>Organisme</b>	MEDU - Ministerio de Educación y Ciencia
<b>Programa</b>	NCTQ - Programa Nacional de Ciencias y Tecnologías Químicas
<b>Codi oficial</b>	CTQ2005-08459-C02-02/BQU
<b>Data d'inici</b>	31/12/2005
<b>Anys de durada</b>	3

● <b>Títol</b>	Modelización molecular de compuestos con metales de transición: aplicaciones a la catálisis y a compuestos de alta nuclearidad
<b>Participació/Grup</b>	Josep Maria Poblet Rius (investigador principal) Joan Igual, Joan Carbó i Antonio Rodriguez (col-laboradors) QQ
<b>Organisme</b>	DGIN - Dirección General de Investigación
<b>Programa</b>	NCTQ - Programa Nacional de Ciencias y Tecnologías Químicas
<b>Codi oficial</b>	CTQ2005-06909-C02-01/BQU
<b>Data d'inici</b>	31/12/2005
<b>Anys de durada</b>	3

● <b>Títol</b>	Grup de materials catalítics
<b>Participació/Grup</b>	Maria Pilar Salagre Carnero i Yolanda Cesteros (col-laboradores) CATHETER
<b>Organisme</b>	GRQ - Ajuts per potenciar els grups de recerca de qualitat
<b>Programa</b>	DGR - Direcció General de Recerca
<b>Codi oficial</b>	SGR-00547
<b>Data d'inici</b>	2005
<b>Anys de durada</b>	3

● <b>Títol</b>	Grup de Física i Cristal·lografia de Materials.
<b>Participació/Grup</b>	Francisco M. Díaz González (investigador principal) Massons, J.; Gavaldà, J.; Solé, R.M.; Pujol, M.C., Aguiló, M. (col·laboradors) FICMA/FICNA
<b>Organisme</b>	DGR - Direcció General de Recerca
<b>Programa</b>	GRQ - Ajuts per potenciar els grups de recerca de qualitat
<b>Codi oficial</b>	SGR2005-00658
<b>Data d'inici</b>	2005
<b>Anys de durada</b>	4

● <b>Títol</b>	Organometàl·lics i Catàlisi Homogènia
<b>Participació/Grup</b>	Maria Carmen Claver Cabrero (investigador principal) Aurora Ruiz, Elena Fernández, Montserrat Diéguez, Oscar Pàmies, Núria Ruiz, Anna M. Masdeu, Arantxa Orejón, Cyril Godard (col·laborador) OMICH
<b>Organisme</b>	Direcció General de Recerca
<b>Programa</b>	Grup consolidat
<b>Codi oficial</b>	2005SGR00777
<b>Data d'inici</b>	2006
<b>Anys de durada</b>	4

● <b>Títol</b>	Suport als Grups de Recerca de Catalunya: Grup de Química quàntica
<b>Participació/Grup</b>	Rosa Caballol Lorenzo (investigador principal) Josep Maria Poblet, Josep Manel Ricart, Joan Igual, Anna Clotet, Mar Reguero, Coen de Graaf, A Rodriguez, Joan Carbó (col·laboradors) QQ
<b>Organisme</b>	AGAUR - Direcció General de Recerca
<b>Programa</b>	GRQ - Ajuts per potenciar els grups de recerca de qualitat
<b>Codi oficial</b>	2005SGR-00104
<b>Data d'inici</b>	2005
<b>Anys de durada</b>	4

● <b>Títol</b>	Preparación y estudio de las propiedades de nuevos materiales catalíticos, compuestos o disoluciones sólidas a base de óxidos
<b>Participació/Grup</b>	Maria Pilar Salagre Carnero (investigador principal) Yolanda Cesteros (col·laboradora) CATHETER
<b>Organisme</b>	AECI - Agencia Española de Cooperación Internacional
<b>Programa</b>	Acció Integrada Marroc-Espanya
<b>Codi oficial</b>	B/5122/06
<b>Data d'inici</b>	12/01/2007
<b>Anys de durada</b>	1

● <b>Títol</b>	Nanoconficat – Confinement de nanoparticules métalliques dans des nanotubes de carbone: vers des catalyseurs hautement sélectifs
<b>Participació/Grup</b>	Anna M. Masdeu (investigador principal) Núria Ruiz i Arantxa Orejón (col·laboradores) OMICH
<b>Organisme</b>	Agence Nationale de la Recherche (Francia),
<b>Programa</b>	Programme National de la Recherche
<b>Codi oficial</b>	PNANO05-0070-A2
<b>Data d'inici</b>	2006
<b>Anys de durada</b>	3

● <b>Títol</b>	Microwave assisted síntesis of fluoro-organic compounds
<b>Participació/Grup</b>	Elena Fernández OMICH
<b>Organisme</b>	MEC
<b>Programa</b>	Acciones Integradas Hispano Austriaca
<b>Codi oficial</b>	HU2005-0028
<b>Data d'inici</b>	01/01/2006
<b>Anys de durada</b>	3

● <b>Títol</b>	Síntesi enantioselectiva d'amines d'interés farmacèutic
<b>Participació/Grup</b>	Maria del Carmen Claver Cabrero (investigador principal) Cyril Godard (col-laborador) OMICH
<b>Organisme</b>	DIUE - Departament d'Innovació, Universitats i Empresa. Generalitat de Catalunya
<b>Programa</b>	Ajuts per a accions de cooperació en el marc de la Comunitat de Treball del Pirineus
<b>Codi oficial</b>	2007ITT-00006
<b>Data d'inici</b>	16/01/2008
<b>Anys de durada</b>	2

● <b>Títol</b>	Innovative approaches for enantioselective catalysis
<b>Participació/Grup</b>	Anna Maria Masdeu Bultó Carmen Claver Cabrero i Arantxa Orejón (col-laboradores)
<b>Organisme</b>	DIUE - Departament d'Innovació, Universitats i Empresa. Generalitat de Catalunya
<b>Programa</b>	Ajuts per a accions de cooperació en el marc de la Comunitat de Treball del Pirineus
<b>Codi oficial</b>	2007ITT-00007
<b>Data d'inici</b>	11/01/2008
<b>Anys de durada</b>	2

■ <b>Títol</b>	Asymmetric catalysis. New Phosphine- and Nitrogen-based ligands for enantioselective reactions with transition metal catalysis
<b>Participació/Grup</b>	Maria del Carmen Claver Cabrero
<b>Organisme</b>	URV - Universitat Rovira i Virgili
<b>Programa</b>	URV-Projectes amb ICIQ
<b>Codi oficial</b>	2007URV-ICIQ-07
<b>Data d'inici</b>	22/11/2007
<b>Anys de durada</b>	3

■ <b>Títol</b>	Estructura electrònica i intercanvi d'ions en nanocapsules d'òxids moleculars
<b>Participació/Grup</b>	Josep Maria Poblet Joan Carbó i Antonio Rodriguez, Carles Bo (col-laboradors) QQ
<b>Organisme</b>	URV - Universitat Rovira i Virgili
<b>Programa</b>	URV-Projectes amb ICIQ
<b>Codi oficial</b>	2007URV-ICIQ-01
<b>Data d'inici</b>	22/11/2007
<b>Anys de durada</b>	3

■ Títol	Intensificació a la dedicació a las actividades de investigación del personal docente e investigador dela URV.
Participació/Grup	Montserrat Diéguez
Organisme	Generalitat
Programa	Intensificació de la Recerca
Codi oficial	PGIR2008
Data d'inici	01/09/2008
Anys de durada	3

■ Títol	Intensificació a la dedicació a las actividades de investigación del personal docente e investigador dela URV.
Participació/Grup	Oscar Pámies
Organisme	Generalitat
Programa	Intensificació de la Recerca
Codi oficial	PGIR2008
Data d'inici	01/09/2008
Anys de durada	3

■ Títol	Intensificació a la dedicació a las actividades de investigación del personal docente e investigador dela URV.
Participació/Grup	Yolanda Cesteros
Organisme	Generalitat-URV
Programa	Intensificació de la Recerca
Codi oficial	PGIR2008
Data d'inici	01/09/2008
Anys de durada	3

■ Títol	Intensificació a la dedicació a las actividades de investigación del personal docente e investigador dela URV.
Participació/Grup	Elena Fernández
Organisme	Generalitat-URV
Programa	Intensificació de la Recerca
Codi oficial	PGIR2008
Data d'inici	01/09/2008
Anys de durada	3

● Títol	Obtenció i preparació de materials per aplicacions fotòniques ( Equip finançat: Maquina per polir mostres de qualitat òptica
Participació/Grup	Francisco Manuel Díaz González (investigador principal) Massons, J.; Gavaldà, J.; Solé, R.M., Mateos, X. (col·laboradors) FICMA/FICNA
Organisme	AGAU - Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR)
Programa	XXTT - Ajuts per al desenvolupament i consolidació de xarxes temàtiques
Codi oficial	1322 U07 E30 N-2007PEIR/09
Data d'inici	2008
Anys de durada	1

● Títol	Xarxa de referència d'R+D+I en Química Teòrica i Computacional
Participació/Grup	Josep Maria Poblet, Josep Manel Ricart, Joan Igual, Anna Clotet, Mar Reguero, Coen de Graaf, A Rodriguez, Joan Carbó (col·laboradors) QQ
Organisme	Departament d'innovació, Universitats i Empresa, Generalitat de Catalunya
Programa	XXTT - Ajuts per al desenvolupament i consolidació de xarxes temàtiques
Codi oficial	T07029N
Data d'inici	2006
Anys de durada	3

● <b>Títol</b>	Obtenció de nanoceràmiques per aplicacions fotòniques ( Equip finançat: Cambra d'alta Temperatura)
<b>Participació/Grup</b>	Magdalena Aguiló Díaz (investigador principal) Díaz, F, Pujol Baiges, M.C. Carvajal, J.J.,(col·laboradors) FICMA/FICNA
<b>Organisme</b>	Direcció General de Recerca
<b>Programa</b>	Infraestructura per a la Recerca
<b>Codi oficial</b>	1322 U07 E30 N-2007PEIR/08
<b>Data d'inici</b>	2008
<b>Anys de durada</b>	1

● <b>Títol</b>	Síntesis de isocianatos: Carbonilación oxidante de anilinas con catalizadores de cobalto
<b>Participació/Grup</b>	María del Carmen Claver Cabrero OMICH
<b>Organisme</b>	CICY - Comisión Interministerial de Ciencia y Tecnología
<b>Programa</b>	PETR - Programa d'estímul a la transferència de resultats d'investigació
<b>Codi oficial</b>	PTR1995-0874-OP
<b>Data d'inici</b>	25/08/2005
<b>Anys de durada</b>	3

● <b>Títol</b>	Recuperación de recursos hídricos contaminados con nitratos y nitritos mediante la tecnología de hidrogenación catalítica: escalado a planta piloto y de demostración
<b>Participació/Grup</b>	Pilar Salagre i Yolanda Cesteros (col·laboradores) CATHETER
<b>Organisme</b>	DGIN - Dirección General de Investigación
<b>Programa</b>	PETRI - Programa d'estímul a la transferència de resultats d'investigació
<b>Codi oficial</b>	PET2006-0816
<b>Data d'inici</b>	24/11/2007
<b>Anys de durada</b>	2

● <b>Títol</b>	Síntesis de isocianatos: Carbonilación oxidante de anilina con catalizadores de cobalto
<b>Participació/Grup</b>	Carmen Claver (investigador principal) María Pilar Salagre Carnero (col·laboradora) OMICH/CATHETER
<b>Organisme</b>	Ministerio de Ciencia y Tecnología.
<b>Programa</b>	PETRI - Programa d'estímul a la transferència de resultats d'investigació
<b>Codi oficial</b>	PTR1995-0874-OP
<b>Data d'inici</b>	2006
<b>Anys de durada</b>	3

## Contractes amb empreses

● <b>Títol</b>	Medida de volúmenes de agua extraídos de pozos de la zona de Tarragona y del volumen de entrada en el punto de embarque del Puerto de Tarragona
<b>Participació/Grup</b>	Pilar Salagre i Yolanda Cesteros (col-laboradores) CATHETER/AMIC
<b>Empresa</b>	Agencia Catalana del Agua
<b>Codi oficial</b>	J080055
<b>Data d'inici</b>	01/07/2008
<b>Anys de durada</b>	1

● <b>Títol</b>	Asesoramiento en la implantación y puesta en funcionamiento de una planta de despolimerización catalítica.
<b>Participació</b>	Pilar Salagre i Yolanda Cesteros (col-laboradores) CATHETER/AMIC
<b>Empresa</b>	Griñol Ecologic S.L.U
<b>Codi oficial</b>	J08004S
<b>Data d'inici</b>	01/07/2008
<b>Anys de durada</b>	1

● <b>Títol</b>	Desarrollo en Magmoléculas. Investigación básica y aplicada para otros isótopos de interés y aplicación industrial para un efluente real
<b>Participació/Grup</b>	Pilar Salgre i Yolanda Cesteros (col-laboradores) CATHETER/AMIC
<b>Empresa</b>	Empresa Nacional de Residuos, S.A. (ENRESA).
<b>Codi oficial</b>	J08003S
<b>Data d'inici</b>	01/03/2008

● <b>Títol</b>	Caracterización de un producto y desarrollo de nuevas líneas de productos de interés para la empresa Manuel Vilaseca, S.A.
<b>Participació/Grup</b>	Pilar Salgre i Yolanda Cesteros (col-laboradores) CATHETER/AMIC
<b>Empresa</b>	Manuel Vilaseca S.A
<b>Codi oficial</b>	J08002S
<b>Data d'inici</b>	17/03/2008
<b>Anys de durada</b>	0,5

● <b>Títol</b>	Preparación de catalizadores, diseño de reactores, asesoramiento, asistencia técnica y dirección en el proyecto "construcción de una planta de eliminación de nitratos en el municipio del Morell.
<b>Participació/Grup</b>	Pilar Salgre i Yolanda Cesteros (col-laboradores) CATHETER/AMIC
<b>Empresa</b>	Aplicacions de la Catàlisi, S.L
<b>Codi oficial</b>	J07008S
<b>Data d'inici</b>	19/12/2007
<b>Anys de durada</b>	1

● <b>Títol</b>	General de intensificació de la investigació
<b>Participació</b>	Yolanda Cesteros
<b>Empresa</b>	Empresa Plasfi Chemical, S.L.
<b>Programa</b>	General de intensificació de la investigació
<b>Codi oficial</b>	2008PGIR/06
<b>Data d'inici</b>	01/07/08
<b>Anys de durada</b>	3

● <b>Títol</b>	Avaluació radiològica de les dades de la Xarxa de Vigilància Radiològica a l'entorn de les centrals nuclears de Vandellós i Ascó.
<b>Participació</b>	Miguel López Tortosa (investigador principal) F.Díaz (col·laborador) FICMA/FICNA
<b>Empresa</b>	Departament d'Economia i Finances de la Generalitat de Catalunya
<b>Codi oficial</b>	N.I.
<b>Data d'inici</b>	2008
<b>Anys de durada</b>	1

● <b>Títol</b>	Desenvolupament d'un làser fraccional de Tuli per aplicacions dermatològiques
<b>Participació</b>	Magdalena Aguiló Díaz (investigador principal) Díaz, F.; Pujol Baiges, M.C. Carvajal, J.J., Mateos, X (col·laboradors) FICMA/FICNA
<b>Empresa</b>	SORISA
<b>Codi oficial</b>	T07207S
<b>Data d'inici</b>	2007
<b>Anys de durada</b>	3

● <b>Títol</b>	Desenvolupament d'un nou Làser verd a partir d'un innovador material autodoblador
<b>Participació</b>	Magdalena Aguiló (investigador principal) Díaz, F., Solé, R.M.; Pujol Baiges, M.C. Carvajal, J.J., Mateos, X (col·laboradors) FICMA/FICNA
<b>Empresa</b>	MONOCROM S.L
<b>Codi oficial</b>	N.I.
<b>Data d'inici</b>	2008
<b>Anys de durada</b>	1

● <b>Títol</b>	Determinación de impurezas en muestras de grafito pocedente del desmantelamiento realizado en PIMIC
<b>Participació</b>	Magdalena Aguiló (investigador principal) Díaz, F., Pujol Baiges, M.C. Carvajal, J.J., Mateos, X (col·laboradors) FICMA/FICNA
<b>Empresa</b>	Empresa Nacional de Residuos Radioactivos, S.A. (ENRESA)
<b>Codi oficial</b>	T08052S
<b>Data d'inici</b>	2008
<b>Anys de durada</b>	1

● <b>Títol</b>	Activitats d'assessorament i assistència tècnica en Radiofísica Hospitalaria
<b>Participació</b>	Miguel López Tortosa (investigador principal) F.Díaz (col·laborador) FICMA/FICNA
<b>Empresa</b>	FURV-Asesoría Gestión Servicios de Ingeniería y Gestión Medioambiental S.A.L. (ASIGMA).
<b>Codi oficial</b>	T08002S
<b>Data d'inici</b>	2008
<b>Anys de durada</b>	1

<b>● Títol</b>	Gestió i control de les Xarxes de Vigilància Radiològica Ambiental.
<b>Participació</b>	Miguel López Tortosa (investigador principal) F.Díaz (col·laborador) FICMA/FICNA
<b>Empresa</b>	FURV- Departament d'Economia i Finances de la Generalitat de Catalunya
<b>Codi oficial</b>	T08015S
<b>Data d'inici</b>	2008
<b>Anys de durada</b>	1

<b>● Títol</b>	Subministrament i posada en marxa de dos sistemes de mesura espectromètrica de radiació gamma en aigua de riu, de monitorització i transmissió de dades meteorològiques associades a l'entorn de les centrals nuclears de Vandellós i Ascó i de visió ambiental.
<b>Participació</b>	Miguel López Tortosa (investigador principal) F.Díaz (col·laborador) FICMA/FICNA
<b>Empresa</b>	FURV- Departament d'Economia i Finances de la Generalitat de Catalunya
<b>Codi oficial</b>	T08157S
<b>Data d'inici</b>	2008
<b>Anys de durada</b>	1

<b>● Títol</b>	Avaluació radiològica de les dades de la Xarxa General de Vigilància Radiològica Ambiental de la Generalitat de Catalunya.
<b>Participació</b>	Miguel López Tortosa (investigador principal) F.Díaz (col·laborador) FICMA/FICNA
<b>Empresa</b>	FURV- Departament d'Economia i Finances de la Generalitat de Catalunya
<b>Codi oficial</b>	T08156S
<b>Data d'inici</b>	2008
<b>Anys de durada</b>	1

<b>● Títol</b>	Avaluació radiològica de les dades de la Xarxa de Vigilància Radiològica a l'entorn de les centrals nuclears de Vandellós i Ascó.
<b>Participació</b>	Miguel López Tortosa (investigador principal) F.Díaz (col·laborador) FICMA/FICNA
<b>Empresa</b>	FURV- Departament d'Economia i Finances de la Generalitat de Catalunya
<b>Codi oficial</b>	T08167S
<b>Data d'inici</b>	2008
<b>Anys de durada</b>	1

<b>● Títol</b>	Síntesis de materias primas e intermediarios de aplicación en cosmética y ceras
<b>Participació</b>	Dra. Elena Fernández OMICH
<b>Empresa</b>	Mystar S.L.
<b>Codi oficial</b>	N.I.
<b>Data d'inici</b>	01/09/2008
<b>Anys de durada</b>	1

● <b>Títol</b>	Síntesis de isocianatos sin fosgeno. Estudios de carbonilación (Synthesis of isocyanates without phosgene. Carbonylation studies).
<b>Participació</b>	Carmen Claver Cabrero (Investigador principal) Cyril Godard, Ali Aghmiz (col·laborador) OMICH
<b>Empresa</b>	RYPF - Repsol YPF S.A
<b>Codi oficial</b>	N07002S
<b>Data d'inici</b>	2007
<b>Anys de durada</b>	1

## **5.- Resultats de recerca**

### **4.1.-Publicacions**

S'ha publicat, durant l'any 2008, 68 articles en revistes internacionals, i en cites s'ha aconseguit un índex *h* de 37. També s'han presentat un gran nombre de comunicacions a congressos nacionals i internacionals.

#### **Articles en revistes**

##### **Catàlisis Heterogènea**

- **Autors:** Montanari, T.; Salla, I.; Busca, G.  
**Títol:** Adsorption of CO on LTA zeolite adsorbents: an IR investigation.  
**Revista:** Microporous and Mesoporous Materials, **2008**, 109 (1-3), 216-222.
- **Autors:** Bergadà, O.; Salagre, P.; Cesteros, Y.; Medina, F.; Sueiras, J.E.  
**Títol:** Control of the basicity in Ni-MgO systems. Influence in the hydrogenation of styrene oxide  
**Revista:** Catalysis Letters, **2008**, 122 (3), 259-266.
- **Autors:** Aranzazu Orejón; Anna M. Maseu-Bultó; Pilar Salagre; Sergio Castellón; Carmen Claver; Ana Padilla; Beatriz Almena y Francisco Luis Serrano  
**Títol:** Strategies for the immobilization of homogeneous catalysts and their use in the synthesis of carbamates  
**Revista:** Ind. Eng. Chem. Research, **2008**, 47, 8032-8036.

##### **Física i Cristal·lografia de Materials**

- **Autors:** Silvestre, O; Grau, J; Pujol, MC, ; Massons, J.; Aguiló, M.; Díaz, F.; Mieczyslaw Tadeusz Borowiec, M.T.; Szewczyk, A.; Gutowska, M.U.; Massot, M.; Salazar, A. and Petrov, V.  
**Títol:** Thermal properties of monoclinic KLu(WO<sub>4</sub>)(2) as a promising solid state laser host  
**Revista:** Optics Express, **2008**, 16, 7, 5022-5034.
- **Autors:** Schmidt, A; Rivier, S; Steinmeyer, G, . Jong Hyuk Yim, J.H.; Cho, W.B. Lee, S. ;F. Rotermund, M.C. Pujol, Mateos, X; Aguiló, M. ; Díaz, F. ; Petrov, V. and Griebner, U.  
**Títol:** Passive mode locking of Yb : KLuW using a single-walled carbon nanotube saturable absorber  
**Revista:** Optics Letters, **2008**, 33, 7, 729-731.
- **Autors:** Sole, R., Guell, F, Jna. Gavaldà, M. Aguiló, and F. Díaz,  
**Títol:** Ba<sub>3</sub>Yb(BO<sub>3</sub>)<sub>3</sub> single crystals: Growth and spectroscopic characterization  
**Revista:** Journal of Materials Research, **2008**, 23, 2512- 2518.
- **Autors:** S. Tkaczyk, M. Galceran, S. Pret, M. C. Pujol, M. Aguiló, F. Díaz, A.H. Reshak, I.V. Kityk,  
**Títol:** UV-excited piezo-optical effects in oxide nanocrystals incorporated into PMMA matrices,  
**Revista:** Acta Materialia, **2008**, 56, 5677- 5684.
- **Autors:** Rivier, S. ; Mateos, X.,; Silvestre, O.,; Petrov, V.,; Griebner, U.,; Pujol, M.C.,; Aguiló, M.,; Díaz, F.,; Vernay, S. and Rytz, D.  
**Títol:** Thin-disk Yb : KLu(WO<sub>4</sub>)(2) laser with single-pass pumping  
**Revista:** Optics Letters, **2008**, 33, 735-737.
- **Autors:** Bjurshagen, S.; Brynolfsson, P.; Pasiskevicius, V.; Parreu, I.; Pujol, M.C.; Peña, A.; Aguiló, M. and Díaz, F.  
**Títol:** Crystal growth, spectroscopic characterization, and eye-safe laser operation of erbium- and ytterbium-codoped KLu(WO<sub>4</sub>)(2)  
**Revista:** Applied Optics, **2008**, 47, 5, 656-665.

- **Autors:** Galceran, M; Pujol, M.C.; Aguiló, M.; Díaz, F.  
**Títol:** Synthesis and characterization of nanocrystalline Yb : Lu<sub>2</sub>O<sub>3</sub> by modified Pechini method  
**Revista:** Materials Science and Engineering B-Solid State Materials for Advanced Technology, **2008** 146,1-3,7-15 .
- **Autors:** Silvestre, O.; Pujol, M.C.; Solé, R.; Bolaños, W.; Carvajal, J.J.; Massons, J.; Aguiló, M.; Díaz, F  
**Títol:** Ln(3+): KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>/KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> epitaxial layers: Crystal growth and physical characterisation.  
**Revista:** Materials Science and Engineering B-Solid State Materials for Advanced Technology, **2008** 146,1-3, 59-65.
- **Autors:** Pujol, MC; Cascales, C; Aguiló, M, Díaz, F.  
**Títol:** Crystal growth, crystal field evaluation and spectroscopy for thulium in monoclinic KGd(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> and KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> laser crystals ,  
**Revista:** Journal of Physics-Condensed Matter, **2008**, 20, 34, 345219-345228
- **Autors:** Vilalta, A; Carvajal, JJ; Pena, A.; Massons, J.; Díaz, F. and Aguiló, M.  
**Títol:** Growth and structural characterization of RbTi<sub>1-x</sub>GexOPO<sub>4</sub> crystals  
**Revista:** Journal of Crystal Growth, **2008**, 310, 2633-2639.
- **Autors:** Shalimov, A; Borowiec, MT; Zayarnyuk, T, ; Pujol, M.C.; Aguiló, M. and Díaz, F.  
**Títol:** Coherence length of the KY(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> single crystal.  
**Revista:** Acta Crystallographica Section B-Structural Science, **2008**, 64, 287-290.
- **Autors:** Solé, R.; Silvestre, O.; Massons, J.; Gavaldà, Jna.; Aguiló, M.; Díaz, F.  
**Títol:** Physical properties of the 0.12 KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>-0.88 K<sub>2</sub>W<sub>2</sub>O<sub>7</sub> solution and single-crystal growth of KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>,  
**Revista:** Journal of Crystal Growth, **2008**, 310, 1167-1173.
- **Autors:** Mateos, X.; Solé, R.; Gavaldà, Jna.; Aguiló, M.; Massons, J.; Díaz, F.  
**Títol:** Ultraviolet and visible emissions of Er<sup>3+</sup> in monoclinic KYb(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> single crystals  
**Revista:** Journal of Alloys and Compounds, **2008**, 450, 314-317.
- **Autors:** J.M. Cano-Torres, X. Hana, A. García Corté, M.D. Serrano, C. Zaldo , F.J. Valle , X. Mateos , S. Rivier, U. Griebner , V. Petrov  
**Títol:** Infrared spectroscopic and laser characterization of Tm in disordered double tungstates  
**Revista:** Materials Science and Engineering B-Solid State Materials for Advanced Technology, **2008**, 146, 22-28.
- **Autors:** lumei Han, José M. Cano-Torres, Mauricio Rico, Concepción Cascales, Carlos Zaldo, Xavier Mateos, Simon Rivier, Uwe Griebner and Valentin Petrov  
**Títol:** Spectroscopy and efficient laser operation near 1.95 μm of Tm<sup>3+</sup> in disordered NaLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>.  
**Revista:** Journal of Applied Physics **2008**, 103, 083110-1 083110-8.
- **Autors:** Junhai Liu, Huaijin Zhang, Xavier Mateos, Wenjuan Han, and Valentin Petrov  
**Títol:** Bistable laser operation of a Yb<sub>0.0054</sub>:Y<sub>0.3481</sub>Gd<sub>0.6465</sub>VO<sub>4</sub> mixed crystal  
**Revista:** Optics Letters, **2008**, 33, 1810-1812.
- **Autors:** Junhai Liu, Huaijin Zhang, Xavier Mateos, Wenjuan Han, Valentin Petrov, and Jiyang Wang  
**Títol:** Low quantum defect laser oscillation of a new mixed Yb<sub>0.009</sub>:Y<sub>0.575</sub>Gd<sub>0.416</sub>VO<sub>4</sub> crystal  
**Revista:** Optics Express, **2008**, 16, 17729-17734.

- **Autors:** J. Liu, H. Yang, Zhang, X. Mateos, V. Petrov, and J. Wang  
**Títol:** Laser performance of disordered Yb:Ca<sub>3</sub>(NbGa)<sub>2-x</sub>Ga<sub>3</sub>O<sub>12</sub> crystal under diode pumping at 974 – 976 nm  
**Revista:** Laser Physics Letters, **2008**, 5, 874-878.
- **Autors:** O.Silvestre, A.Aznar, R. Solé, M.C.Pujol, F. Díaz and M. Aguiló.  
**Títol:** Lattice mismatch and crystal growth of monoclinic KY<sub>1-x</sub>Ybx(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>/KY(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> layers by liquid phase epitaxy  
**Revista:** Journal of Physics-Condensed Matter, **2008**, 20, 225004.1-225004.10
- **Autors:** J. Carrera, X. Ruiz, L. Ramirez-Piscina, J. Casademunt, M. Dreyer  
**Títol:** Generation of a monodisperse microbubble jet in microgravity,  
**Revista:** American Institute of Aeronautics and Astronautics, AIAA, **2008**, 2010-2019.
- **Autors:** S. Arias, X. Ruiz, L. Ramirez-Piscina, J. Casademunt, R. González-Cinca,  
**Títol:** Experimental Study of a Microchannel bubble injector for Microgravity Applications, Microgravity  
**Revista:** Microgravity Science and Technology, **2008**, 107-111.

### Organometàl·lics i Catàlisi Homogènia

- **Autors:** Tortosa-Estorach, C.; Masdeu-Bultó, A.M.  
**Títol:** Hydroesterification of 1-alkenes in supercritical carbon dioxide  
**Revista:** Catalysis Letters, **2008**, 122 (1-2): 76-79.
- **Autors:** Tortosa-Estorach, C.; Orejón, A.; Ruiz, N.; Masdeu-Bultó, A.M.; Laurency, G.  
**Títol:** Hydrocarboxylation of terminal alkenes in supercritical carbon dioxide  
**Revista:** Journal of Molecular Catalysis A-Chemical, **2008**, 26, 2789-2791.
- **Autors:** Rodríguez, L.I.; Rossell, O.; Seco, M.; Orejón, A.; Masdeu-Bultó, A.M.  
**Títol:** Palladocarbosilane dendrimers as catalysts for the asymmetric hydrovinilation of styrene in supercritical carbon dioxide  
**Revista:** Journal of Organometallic Chemistry, **2008**, 693 (10), 1857-1860.
- **Autors:** Tortosa-Estorach, C.; Orejón, A.; Masdeu-Bultó, A. M.  
**Títol:** New rhodium catalytic systems with trifluoromethyl phosphite derivatives for the hydroformylation of 1-octene in supercritical carbon dioxide  
**Revista:** Green Chemistry, **2008**, 10, 545-552.
- **Autors:** J. Ramírez, V. Lillo, A. M. Segarra, E. Fernandez  
**Títol:** Catalytic tandem organic sequences through selective boron addition chemistry  
**Revista:** Curr. Org. Chem, **2008**, 12 N°5, 405-423.
- **Autors:** J. Ramírez, M. Sanaú, E. Fernandez  
**Títol:** Gold(0) Nanoparticles for Selective Catalytic Diboration  
**Revista:** Angew. Chem. Int. **2008**, 47, 5194-5197.
- **Autors:** H. Prokopcova, J. Ramírez, E. Fernandez, C. O. Kappe  
**Títol:** Microwave-assisted one-pot diboration/Suzuki cross-couplings. A rapid route to tetrasubstituted alkenes  
**Revista:** Tetrahedron Letters, **2008**, 49, 4831-5835.
- **Autors:** Dirk Penno, Vanesa Lillo, Igor O. Koshevoy, Mercedes Sanaú, M. Angeles Ubeda, Pascual Lahuerta, Elena Fernández  
**Títol:** Multifaceted Palladium catalysts towards the tandem diboration-arylation reaction of alkenes  
**Revista:** Chemistry: A European Journal, **2008**, 10648-10655

- **Autors:** Elena Fernández  
**Títol:** Catalytic tandem organic sequences through selective boron addition chemistry  
**Revista:** *PharmaChem*, **2008**, *8*, 16-19.
- **Autors:** Axet, M. Rosa; Castillon, Sergio; Claver, Carmen; Philippot, Karine; Lecante, Pierre; Chaudret, Bruno  
**Títol:** Chiral diphosphite-modified rhodium(0) nanoparticles: catalyst reservoir for styrene hydroformylation.  
**Revista:** *European Journal of Inorganic Chemistry*, **2008**, *22*, 3460-3466.
- **Autors:** Balanta Castillo, A.; Favier, I.; Teuma, E.; Castellón, S.; Godard, C.; Claver, C.; Gómez, M.  
**Títol:** An outstanding palladium system containing C2-symmetrical phosphite ligand for enantioselective allylic substitution processes  
**Revista:** *Chemical Communications*, **2008**, 6197-6199.
- **Autors:** Gual, Aitor; Axet, M. Rosa; Philippot, Karine; Chaudret, Bruno; Denicourt-Nowicki, Audrey; Roucoux, Alain; Castillon, Sergio; Claver, Carmen  
**Títol:** Diphosphite ligands derived from carbohydrates as stabilizers for ruthenium nanoparticles: promising catalytic systems in arene hydrogenation  
**Revista:** *Chemical Communications*, **2008**, *693*, 2759-2761.
- **Autors:** Munoz-Moreno, Bianca K.; Claver, Carmen; Ruiz, Aurora; Bianchini, Claudio; Meli, Andrea; Oberhauser, Werner.  
**Títol:** Synthesis of palladium(II) complexes containing a new a -d-xylofuranose-modified diphosphine and their application as catalyst precursors in the co- and terpolymerization of CO-ethene and propene  
**Revista:** *Dalton Transactions*, **2008**, *693*, *7*, 1269-1275.
- **Autors:** Godard, Cyril; Munoz, Bianca K.; Ruiz, Aurora; Claver, Carmen  
**Títol:** Pd-catalyzed asymmetric mono- and bis-alkoxycarbonylation of vinylarenes  
**Revista:** *Dalton Transactions*, **2008**, 853-860.
- **Autors:** Villagra, Diego; Lopez, Rosa; Moya, Sergio A.; Claver, Carmen; Bastero, Amaia.  
**Títol:** Dipyrrophenazine as Electronic Tunable Ligands for the Palladium-Catalyzed Synthesis of Polyketones  
**Revista:** *Organometallics*, **2008**, *27*, 1019-1021.
- **Autors:** Bella, Antonio F.; Ruiz, Aurora; Claver, Carmen; Sepulveda, Francisco; Jalon, Felix A.; Manzano, Blanca R.  
**Títol:** Pyrazolyl-pyrimidine based ligands in palladium catalyzed copolymerization and terpolymerization of CO/olefins  
**Revista:** *Journal of Organometallic Chemistry*, **2008**, *693*, 1269-1275.
- **Autors:** C. Tortosa Estorach, A. Orejón, N. Ruiz, A. M. Masdeu-Bultó, G. Laurenczy  
**Títol:** Hydrocarboxylation of terminal alkenes in supercritical carbon dioxide  
**Revista:** *Eur. J. Inorg. Chemistry*, **2008**, 3524-3531.
- **Autors:** C. Tortosa Estorach, M. Giménez-Pedrés, A. M. Masdeu-Bultó, A. D. Sayede, E. Monflier  
**Títol:** Hydroformylation of 1-Octene in Supercritical Carbon Dioxide with Rhodium Alkyl P-donor Ligands Using a Peracetylated  $\beta$ -Cyclodextrin as Solubiliser  
**Revista:** *Eur. J. Inorg. Chemistry*, **2008**, *17*, 2659-2663.
- **Autors:** A. Orejón, A. M. Masdeu-Bultó, P. Salagre, S. Castellón, C. Claver, A. Padilla, B. Almena, F. L. Serrano  
**Títol:** Strategies for the immobilisation of homogeneous catalysts and its use in the synthesis of carbamates  
**Revista:** *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **2008**, *47*, 8032-8036.

- **Autors:** Montserrat Diéguez, Javier Mazuela, Oscar Pàmies, J. Johan Verendel and Pher G. Andersson  
**Títol:** Chiral pyranoside phosphite-oxazolines: a new class of ligand for asymmetric catalytic hydrogenation of alkenes  
**Revista:** Journal of the American Chemical Society, **2008**, *130*, 7208-7209.
- **Autors:** Mata, Yvette; Dieguez, Montserrat; Pamies, Oscar; Woodward, Simon  
**Títol:** Screening of modular sugar phosphite-oxazoline and phosphite-phosphoroamidite ligand libraries in the asymmetric nickel-catalyzed trialkylaluminium addition to aldehydes  
**Revista:** Inorganica Chimica Acta, **2008**, *361*, 1381-1384.
- **Autors:** A. Alexakis, J.E. Bäckvall, N. Krause, O. Pàmies, M. Diéguez  
**Títol:** Enantioselective Copper-catalyzed addition and allylic substitution reactions  
**Revista:** Chemical Reviews, **2008**, *108*, 2796-2823.
- **Autors:** M. Diéguez, J. Mazuela, O. Pàmies, J. J. Verendel, P. G. Andersson  
**Títol:** Biaryl Phosphite-Oxazoline from Hydroxyl Aminoacid Derivatives: Highly Efficient Modular Ligands for Ir-Catalyzed Hydrogenation of Alkenes  
**Revista:** Chemical Communications, **2008**, 3888-3890.
- **Autors:** A.B. Rivas, A.J. Pardey, A.M. Masdeu-Bultó, M. Diéguez, L.A. Oro, J.J. Pérez-Torrente  
**Títol:** Hydroformylation of oct-1-ene catalyzed by dinuclear gem-dithiolato-bridged rhodium(I) complexes and phosphorus donor ligands  
**Revista:** Journal of Molecular Catalysis, **2008**, *300*, 121-131.
- **Autors:** López-Serrano, J.; Duckett, S.B.; Dunne, J.P.; Godard, C.; Whitwood, A.C  
**Títol:** Palladium catalysed alkyne hydrogenation and oligomerisation: a parahydrogen based NMR investigation  
**Revista:** Dalton Transactions, **2008**, 4270-4281
- **Autors:** Muñoz, B.K.; Santos Garcia, E.; Godard, C.; Zangrando, E.; Bo, C.; Ruiz, A.; Claver, C.  
**Títol:** HP-NMR study of the Pd-catalyzed methoxycarbonylation of styrene using monodentate and bidentate phosphane-modified systems  
**Revista:** European Journal of Inorganic Chemistry, **2008**, 4625-4637.
- **Autors:** Godard, C.; López-Serrano, J.; Gálvez-López, M.-D.; Duckett, S.B.; Khazal, I.; Lledós A.; Whitwood, A.C.  
**Títol:** Detection of platinum dihydride bisphosphine complexes and studies of their reactivity through parahydrogen-enhanced NMR methods  
**Revista:** Magnetic Resonance in Chemistry, **2008**, S107-S114.

### Química Quàntica

- **Autors:** Romo, S.; de Graaf, C.; Poblet, J.M.  
**Títol:** Mid-gap excitations in Anderson polyoxometalates  
**Revista:** Chemical Physics Letters, **2008**, *450(4-6)*: 391-395.
- **Autors:** Queralt, N.; Taratiel, D.; de Graaf, C.; Caballol, R.; Cimraglia, R.; Angeli, C.  
**Títol:** On the applicability of multireference second-order perturbation theory to study weak magnetic coupling in molecular complexes  
**Revista:** Journal of Computational Chemistry, **2008**, *29(6)*:994-1003.
- **Autors:** Bastardis, R.; de Graaf, C.; Guihery, N.  
**Títol:** Ab initio study of the CE magnetic phase in half-doped manganites: Purely magnetic versus double exchange description  
**Revista:** Physical Review **2008**, B 77, 054426

- **Autors:** Zuidema, E.; Escorihuela, L.; Eichelsheim, T.; Carbó, J. J.; Bo, C.; Kamer, P. C. J.; van Leeuwen P. W. N. M.  
**Títol:** The Rate-Determining Step in the Rhodium-Xantphos-Catalysed Hydroformylation of 1-Octene.  
**Revista:** Chemistry-A European Journal, **2008**, 14(6):1843-53.
- **Autors:** Silvia Osuna, Marcel Swart, Josep M. Campanera, Josep M. Poble and Miquel Solà  
**Títol:** Chemical Reactivity of D3h C78 (Metallo)Fullerenes: Regioselectivity Changes Induced by Sc3N Encapsulation  
**Revista:** Journal of the American Chemical Society, **2008**, 130(19), 6206-14.
- **Autors:** Sadoc, A.; Broer, R.; de Graaf, C.  
**Títol:** CASSCF study of the relation between the Fe charge and the Mossbauer isomer shift  
**Revista:** Chemical Physics Letters, **2008**, 454 (4-6), 196-200.
- **Autors:** F. Leroy, P. Miró, J. M. Poble, C. Bo, J. Bonet-Ávalos  
**Títol:** Keggin Polyoxoanions in Aqueous Solution: Ion Pairing and Its Effect on Dynamic Properties by Molecular Dynamics Simulations  
**Revista:** 909613 - Journal of Physical Chemistry B, **2008**, 112, 8591-8599.
- **Autors:** Likai Yan, Xavier López, Jorge J. Carbó, Richard Sniatynsky, Dean C. Duncan and Josep M. Poble  
**Títol:** On the Origin of Alternating Bond Distortions and the Emergence of Chirality in Polyoxometalate Anions  
**Revista:** 900665 - Journal of the American Chemical Society Seleccionat per l'editorial per a apreixer en JACS select, **2008**, 130, 8223-8233.
- **Autors:** Ramón Valencia, Antoni Rodríguez-Fortea and Josep M. Poble  
**Títol:** Understanding the Stabilization of Metal Carbide Endohedral Fullerenes M2C2@C82 and Related Systems  
**Revista:** Journal of Physical Chemistry A, **2008**, 112, 4550-4555.
- **Autors:** Susanna. Romo, Nadya Antonova, Jorge J Carbó, Josep M. Poble  
**Títol:** : Influence of Polyoxometalate Ligand on the Nature of High-Valent Transition Metal-Nitrido Species. A Theoretical Analysis on Experimentally Known and Unprecedented Compounds  
**Revista:** Dalton Transactions Publicat en la portada de la revista, 5166-5172, 2008.
- **Autors:** Antonio Rodríguez-Fortea, Laia Vilà and Josep M. Poble  
**Títol:** Hydration of Hydrogentungstate Anions at Different pH Conditions: A Car-Parrinello Molecular Dynamics Study  
**Revista:** Inorganic Chemistry, **2008**, 47, 7745-7750.
- **Autors:** Jorge J. Carbó, Octavio-González del Moral, Avelino Martín, Josep M. Poble, Miguel Mena, Cristina Santamaria  
**Títol:** Construction of titanasiloxanes by incorporation of silanols to the molecular oxide model [ $\text{Ti}(\text{h}5\text{-C}5\text{Me}5)(\mu\text{-O})_3(\mu\text{-CR})$ ]. DFT elucidation of the reaction mechanism  
**Revista:** Chemistry-A European Journal, **2008**, 14, 7930-7938.
- **Autors:** Negodaev, I.; de Graaf, C.; Caballol, R.  
**Títol:** On the Heisenberg behaviour of magnetic coupling in the manganese dimer  
**Revista:** Chemical Physics Letters, **2008**, 458, 290-294.
- **Autors:** Bastardis, R.; Guihery, N.; de Graaf, C.  
**Títol:** Isotropic non-Heisenberg terms in the magnetic coupling of transition metal complexes  
**Revista:** Journal of Chemical Physics, **2008**, 129, 104102.1-104102.7.
- **Autors:** Ordejón, B.; de Graaf, C.; Sousa, C.  
**Títol:** Light-Induced Excited-State Spin Trapping in Tetrazole-Based Spin Crossover Systems  
**Revista:** Journal of the American Chemical Society, **2008**, 130, 13961-13968.

- **Autors:** Singh, R.; de Graaf, C.; Colacio, E.; Rajak, K.K.  
**Títol:** Mononuclear and binuclear iron(III) complexes incorporating N4O3 coordinating heptadentate ligand: Synthesis, structure and magnetic properties  
**Revista:** Polyhedron, **2008**, 27, 2751-2756.
- **Autors:** López, X.; Rohmer, M.-M.; Bénard, M.  
**Títol:** DFT modelling of the  $[M-Pd-M]^{6+}$  metal atom chains (M = Ni, Pd): Structural, electronic and magnetic issues  
**Revista:** Journal of Molecular Structure, **2008**, 890, 18-23.
- **Autors:** Bénard, M.; Rohmer, M.-M.; López, X.; Theopold, K. H.  
**Títol:** A Tale of Two Isomers (Continued): Is the Phenyl Hydride Complex of Chromium More Stable than Its Benzene-Bridged Isomer?  
**Revista:** Angewandte Chemie-International Edition, **2008**, 47, 5597-5599.
- **Autors:** Lloret, J.; Carbó, J. J.; Bo, C.; Lledós, A.; Pérez-Prieto, J.  
**Títol:** Influence of the Nature of the Ligand on Dirhodium(II) Carbene Species: A Theoretical Analysis.  
**Revista:** Organometallics, **2008**, 27, 2873-2876.
- **Autors:** Mercier Y.; Santoro, F.; Reguero, M.; Improta, R  
**Títol:** The decay from the dark n- $\pi^*$  excited state in uracil: An integrated CASPT2/CASSCF and PCM/TD-DFT study in the gas phase and in water.  
**Revista:** Journal of Physical Chemistry B, **2008**, 112, 10769-10772.
- **Autors:** Zuidema, E.; Sarmentero, M. A.; Bo, C.; Ballester, P.  
**Títol:** A Combined Experimental and Theoretical Study of the Molecular Inclusion of Organometallic Sandwich Complexes in a Cavitand Receptor  
**Revista:** Chemistry-A European Journal, **2008**, 14, 7285-7295.
- **Autors:** Bo, C.; Maseras, F. E.; Sarmentero, M. A.; Bo, C.; Ballester, P.  
**Títol:** QM/MM methods in inorganic chemistry  
**Revista:** Dalton Transactions, **2008**, 2911-2919.
- **Autors:** Gordo, S., Martos, V., Santos, E., Menéndez, M., Bo, C., Giralt, E., de Mendoza, J.  
**Títol:** Stability and structural recovery of the tetramerization domain of p53-R337H mutant induced by a designed templating ligand  
**Revista:** Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, **2008**, 105, 16426-16431.
- **Autors:** Roldan, A.; Viñes, F.; Illas, F. Ricart, J.M., Neyman, K.M.  
**Títol:** Density functional studies of coinage metal nanoparticles: scalability of their properties to bulk  
**Revista:** Theoretical Chemistry Accounts, **2008**, 120, 565-573.
- **Autors:** Roldan, A.; Torres, D.; Ricart, J.M.; Illas, F.  
**Títol:** The chemistry of chlorine on Ag(111) over the sub-monolayer range: A density functional theory investigation  
**Revista:** Surface Science, **2008**, 602, 2639-2642.
- **Autors:** Novell-Leruth, G.; Ricart, J.M.; Pérez-Ramírez, J.;  
**Títol:** Pt(100)-Catalyzed Ammonia Oxidation Studied by DFT: Mechanism and Microkinetics  
**Revista:** Journal of Physical Chemistry C, **2008**, 112, 13554-13562.
- **Autors:** Roldán, A.; González, S.; Ricart, J.M.; Illas, F.;  
**Títol:** Critical Size for O2 Dissociation by Au Nanoparticles  
**Revista:** Chemphyschem, **2008**, 112, 348-351.

## Capítols de llibre

- **Autors:** C. Claver, E. Fernandez  
**Títol:** Part Three-Imino Reductions: Chapter 10-Imine Hydrogenation  
**Libre:** 237-269, Wiley-VCH Book, Modern Reductions. **2008**, 237-269.
- **Autors:** E. Fernandez, A. M. Segarra  
**Títol:** Iridium-catalyzed B-addition  
**Libre:** Wiley-VCH Book Iridium Complexes in organic Synthesis. **2008**.
- **Autors:** Sarasa, J.P., Igual, J., Lazansky, L. Poblet, J.M.  
**Títol:** Towards the precise calculation of  $^{183}\text{W}$  NMR chemical shifts in polyoxotungstates  
**Libre:** Nato Workshop; eds. C. Hill, A. Müller, D. Musaev, Editorial Elsevier, **2008**
- **Autors:** J.M. Poblet, X. López  
**Títol:** Heteropolyoxoanions: computational methods  
**Libre:** Encyclopaedia of Inorganic Chemistry: Book: Computational Inorganic and Bioinorganic Chemistry, eds. Robert Scott, Ed Solomon and Bruce King, Editorial Wiley-VCH, **2008**.

## 5.2.-Patents

1. **Inventors:** Bo, C.; Urbano-Cuadrado, M.; Carbo, J.J.  
**Títol:** *Computational method for the prediction of enantiomeric excesses and absolute configurations by using a DFT-based 3D descriptors*  
**Any:** 2008  
**Països:** AUT - ÀUSTRIA / GBR - REGNE UNIT / DEU - ALEMANYA / CHE - SUÏSSA / ITA - ITÀLIA / FRA - FRANÇA / GRC - GRÈCIA / IRL - IRLANDA / NLD - PAÏSOS BAIXOS / ESP - ESPANYA
2. **Inventores:** Francisco Luis Serrano; Beatriz Almena Muñoz; Ana Padilla Polo; Arancha Orejón Alvarez; Carmen Claver Cabrero; Sergio Castellón Miranda; Pilar Salagre Carnero; Ali Aghmizl  
**Títol:** *One-Step catalytic process for the synthesis of isocyanates and installations for the same*  
**Any:** 2008  
**Nº de solitud:** 11/765,449  
**Pais:** Estats Units d'Amèrica  
**Entidad titular:** REPSOL YPF, S:A.

### **5.3.- Organització de congressos**

Els membres del DQFI han participat en múltiples congressos i reunions tant de caràcter nacional com internacional. Es detalla la participació en els comitès organitzadors, les conferències invitades i les contribucions orals.

**Autors:** C. Claver, M. Diéguez, O. Pàmies  
**Congrés:** COST D40  
**Tipus de participació:** Comitè organitzador  
**Dates:** 20-22 de maig  
**Ciutat:** Tarragona  
**País:** Espanya  
**Any:** 2008

### **5.4.- Participació en congressos**

#### **Conferències invitades**

**Ponent:** Josep M. Poblet.  
**Autors:** Antonio Rodríguez-Forteza, Ramón Valencia  
**Títol:** Redox Properties of Endohedral Fullerenes  
**Tipus de participació:** Conferència invitada  
**Congrés:** Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanoclusters (213 ECS Meeting)  
**Lloc i data:** Phoenix (ESTATS UNITS D'AMÈRICA), 2008.

**Ponent:** Josep M. Poblet  
**Títol:** Computational Studies of Complex Systems Electronic Properties of Endohedral metallofullerenes  
**Tipus de participació:** Conferència invitada  
**Congrés:** From Symplectivity to Complexity: Interplay Experiment and Theory (NATO WORKSHOP)  
**Lloc i data:** Baku (AZERBAITJAN), 2008.

**Ponent :** Josep M. Poblet  
**Títol:** Electronic Properties of Polyoxometalates  
**Tipus de participació:** Conferència invitada  
**Congrés:** ADF WORKSHOP  
**Lloc i data:** Barcelona (ESPANYA), 2008.

**Ponent:** Josep M. Poblet  
**Títol:** Electronic Properties of Polyoxometalates: From Small Clusters to Giant Structures  
**Tipus de participació:** Conferència invitada  
**Congrés:** IX-IBER 2008  
**Lloc i data:** Lisboa (PORTUGAL), 2008.

**Ponent :** F. Díaz  
**Títol:** New approaches for the fabrication of photonic structures of luminescent and non-linear optical materials.  
**Congrés:** The 15th International Conference on Luminescence and Optical Spectroscopy of Condensed Matter (ICL08)  
**Lloc i data:** Lyon, France, 7-11 July 2008

**Ponent:** Maria Cinta Pujol

**Autors:** O. Silvestre, Simon Rivier, X. Mateos, Valentin Petrov, Uwe Griebner, Anna Aznar, Rosa Maria Solé, Jaume Massons, Mieczyslaw Borowiec, Andrzej Szewczyk, Maria Urszula Gutowska, Marta Massot, Agustín Salazar, Sophie Vernay, Daniel Rytz, Magdalena Aguiló and Francesc Díaz.

**Congres:** 17th International Laser Physics Workshop.

**Títol:** Epitaxial grown rare-earth-ion-activated monoclinic double tungstates.

**Lloc i data:** Trondheim, NORWAY, Juny 30-Juliol 4, 2008

**Ponent:** Anna Maria Masdeu

**Títol:** Polymerisation reactions in non-conventional solvents

**Lloc i data:** Université Paul Sabatier, Toulouse (França), Març 2008.

**Ponent:** Anna Maria Masdeu

**Títol:** Carbonylation reactions in non-conventional solvents

**Lloc i data:** University of Kaunas, Kaunas (Lituania), Abril 2008.

**Ponent:** C. De Graaf

**Autors:** C. de Graaf, B. Ordejón, C. Sousa

**Congres:** EUCCO-CC7

**Títol:** Light-Induced Excited State Spin Trapping in Tetrazole-based Spin Crossover systems

**Lloc i data:** Venice, Italy (2008)

## **Comunicacions a congressos**

### **Comunicacions Orals**

**Autors:** M. Galceran, M. C. Pujol, S. Tkaczyk, I. V. Kityk, J. J. Carvajal, M. Aguiló and F. Díaz.

**Congres:** V Encuentro Franco-Español de Química y Física del Estado Sólido.

**Títol:** KTiOPO<sub>4</sub> nanocomposites and their photoinduced nonlinear optics

**Lloc i data:** Clermont-Ferrand, France, 2-4 Abril 2008

**Autors:** J. J. Carvajal, A. Peña, T. Trifonov, A. Rodríguez, R. Alcubilla, J. Pallarés, L.F. Marsal, J. Martorell, M. Aguiló, F. Díaz.

**Congres:** Conferencia Española de Nanofotónica (CEN2008)

**Títol:** 3D photonic structures of non-linear dielectric materials fabricated by epitaxial growth within porous Si templates.

**Lloc i data:** Tarragona, Spain, 2-4 Abril 2008

**Autors:** O. Silvestre, J. Grau, M. C. Pujol, J. Massons M. Aguiló, F. Díaz, M. T. Borowiec, A. Szewczyk, M. U. Gutowska, M. Massot, A. Salazar, and V. Petrov

**Congres:** 3rd Eps-Qeod Europhoton Conference

**Títol:** Thermal properties of the monoclinic laser host KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>

**Lloc i data:** Paris, France, 31th August -5th September 2008.

**Autors:** M. Galceran, M. C. Pujol, R. Solé, M. Aguiló and F. Díaz

**Congres:** The 15th International Conference on Luminiscence and Optical Spectroscopy of Condensed Matter (ICL08)

**Tipo de participación:**

**Títol:** Spectroscopic characterization of Er<sup>3+</sup> and Yb<sup>3+</sup> in monoclinic Er:KYb(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> nanocrystals.

**Lloc i data:** Lyon, France, 7-11 July 2008

**Autors:** J. Venkatesan, X. Mateos, M. C. Pujol, J. Massons, M. Aguiló and F. Díaz.  
**Congres:** The 15th International Conference on Luminiscence and Optical Spectroscopy of Condensed Matter (ICL08)  
**Títol:** Growth and spectroscopy of (Ho,Tm):Klu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub> crystals  
**Lloc i data:** Lyon, France, 7-11 July 2008

**Autors:** F. Khliissa, M. Férid, M. C. Pujol, F. Güell, X. Mateos, J. J. Carvajal, M. Aguiló  
**Congres:** V Encuentro Franco-Español de Química y Física del Estado Sólido. Clermont-Ferrand, 2-4 Abril 2008  
**Títol:** Characterization and spectroscopic study of europium-doped NaY(PO<sub>3</sub>)<sub>4</sub>  
**Lloc i data:** Clermont-Ferrand ,France,2-4 Abril 2008

**Autors:** J. J. Carvajal, A. Peña, T. Trifonov, A. Rodríguez, R. Alcubilla, J. Pallarès, L. F. Marsal, J. Martorell, M. Aguiló, F. Díaz.  
**Congres:** V Encuentro Franco-Español de Química y Física del Estado Sólido.  
**Títol:** Fabrication of 3D photonic structures of non-linear dielectric materials by liquid-phase epitaxy within a Si macroporous membrane.  
**Lloc i data:** Clermont-Ferrand, France,2-4 Abril 2008

**Autors:** X. Mateos, A. Peña, J. J. Carvajal, Jna. Gavalda, M. Aguiló and F.Díaz, V.Petrov, P. Segonds, B. Boulanger.  
**Congres:** V Encuentro Franco-Español de Química y Física del Estado Sólido.  
**Títol:** Diode Pumped Yb:Nb:RbTiOPO<sub>4</sub> laser  
**Lloc i data:** Clermont-Ferrand ,France,2-4 Abril 2008

**Autors:** M. Galceran, M. C. Pujol, S. Tkaczyk, I. V. Kityk, J. J. Carvajal, M. Aguiló and F. Díaz.  
**Congres:** Conferencia Española de Nanofotónica (CEN2008)  
**Títol:** Photoinduced nonlinear optics in KTiOPO<sub>4</sub> nanocrystals embedded within PMMA matrix.  
**Lloc i data:** Tarragona,Spain, 2-4 Abril 2008

**Autors:** Joan J. Carvajal, Magdalena Aguiló, Francesc Díaz, J. Carlos Rojo.  
**Congres:** Conferencia Española de Nanofotónica (CEN2008)  
**Títol:** Green and red emissions at room temperature on Er-doped GaN submicrometer rods synthesized by a simple chemical vapor deposition technique.  
**Lloc i data:** Tarragona,Spain, 2-4 Abril 2008

**Autors:** A. Peña, J. J. Carvajal, M. Aguiló, F. Díaz.  
**Congres:** The 15th International Conference on Luminiscence and Optical Spectroscopy of Condensed Matter (ICL08)  
**Títol:** Enhanced green, red and near-IR emissions of Er<sup>3+</sup> by energy transfer from Yb<sup>3+</sup> in Er: Yb: RbTi<sub>1-x</sub>Nb<sub>x</sub>OPO<sub>4</sub> single crystals  
**Lloc i data:** Lyon, France, 7-11 July 2008

**Autors:** J.J. Carvajal, J.C. Rojo  
**Congres:** Conferencia Española de Nanofotónica 2008,  
**Títol:** Controlling GaN nanowires morphologies via substrate engineering  
**Lloc i data:** Tarragona (Spain), April 2008

**Autors:** B. Raghathamachar, J. Carvajal, M. Dudley  
**Congres:** MRS Spring Meeting 2008  
**Títol:** Synthesis of GaN nanostructures at low temperatures by chemical vapor deposition,  
**Lloc i data:** San Francisco (USA), March 2008

**Autors:** S. Rivier, X. Mateos, Ò. Silvestre, V. Petrov, U. Griebner, M. C. Pujol, M. Aguiló, F. Diaz, S. Vernay, D. Rytz

**Congres:** 3rd Eps-Qeod Europhoton Conference

**Títol:** Thin-disk lasers with highly-doped Yb:KLu(WO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>

**Lloc i data:** Paris, France, 31th August -5th September 2008.

**Autors:** Vanesa Lillo, Amadeu Bonet, E. Fernández

**Congres:** XIII International Conference on Organometallic Chemistry

**Títol:** Catalytic tandem organic sequences through selective boron addition chemistry

**Lloc i data:** Rennes Julio 2008

**Autors:** Isabel Vicente; Pilar Salagre; Yolanda Cesteros; Francesc Medina; Jesús E. Sueiras

**Congres:** XXI Iberoamericano de Catálisis ( SICAT)

**Títol:** Hydrogenation of styrene oxide using Ni supported on microwave synthesized hectorite

**Lloc i data:** Benalmádena- Málaga, 2008

**Autors:** E. Fernández, Vanesa Lillo, Amadeu Bonet, Jesus Ramírez

**Congres:** XIII Imeboron

**Tipo de participació:** Comunicació oral.

**Títol:** The benefits of B towards a selective functionalization of targeted molecules

**Lloc i data:** Platja d'Aro, Septiembre 2008

**Autors:** Carbó, J.J.

**Congres:** Jornadas Técnicas de la IV Asamblea General de Plataforma SusChem España.

**Títol:** Desarrollo y Aplicación de Aproximaciones QSSR (/Quantitative Structure-Selectivity Relationship/) basados en Descriptores Mecano-Cuánticos 3D en el Diseño de Catalizadores Asimétricos.

**Lloc i data:** Barcelona (España), 2008

**Autors:** C. de Graaf, B. Ordejón, C. Sousa

**Congres:** Invited stay at the Department of Physical Chemistry, University of Geneva

**Títol:** Light-Induced Excited State Spin Trapping in Tetrazole-based Spin Crossover systems

**Lloc i data:** Switzerland (2008)

**Autors:** C. de Graaf, B. Ordejón, C. Sousa

**Congres:** 6th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications – ESPA 2008,

**Títol:** Light-Induced Excited State Spin Trapping in Tetrazole-based Spin Crossover systems

**Lloc i data:** Palma de Mallorca, Spain (2008)

### **Posters:**

**Autors:** Amadeu Bonet, Vanesa Lillo, Auxiliadora Prieto, Jesus Ramírez, M. Mar Díaz-Requejo, P. J. Perez, E. Fernández

**Congres:** XIII International Conference on Organometallic Chemistry

**Títol:** Cu-NHC mediates selective catalytic approach to  $\alpha$ -boryl compounds

**Lloc i data:** Florencia, Julio 2008

**Autors:** Vanesa Lillo, E. Fernández

**Congres:** XIII Imeboron

**Títol:** Cu-, Ag-, and Au- mediates selective borylative cyclization of 1,n-enynes

**Lloc i data:** Platja d'Aro, Septiembre 2008

**Autors:** Xavier Cardó; Yolanda Cesteros; Pilar Salagre; Francesc Medina; Jesús E. Sueiras

**Congres:** 14 th International Congress on Catalysis

**Títol:** Catalytic Isomerization of linoleic acid to obtain conjugated linoleic acids (CLAs) of nutritional and biomedical interest

**Lloc i data:** Seúl (Corea), 2008

**Autors:** Isabel Vicente; Pilar Salagre; Yolanda Cesteros;; Francesc Medina; Jesús E. Sueiras  
**Congres:** 14 th International Congress on Catalysis  
**Títol:** Ni-nanoparticles supported on microwave synthesized hectorite. Competition among reactions in the hydrogenation of styrene oxide  
**Lloc i data:** Seúl (Corea) 2008

**Autors:** Xavier Cardó; Olga Bregada; Yolanda Cesteros; Pilar Salagre; Francesc Medina; Jesús E. Sueiras  
**Congres:** XXI Iberoamericano de Catálisis (SICAT)  
**Títol:** Effect of catalyst acidity and porosity on the catalytic isomerization of linoleic acids  
**Lloc i data:** Benalmádena- Málaga, 2008

**Autors:** Dolores González; Pilar Salagre; Yolanda Cesteros; Francesc Medina; Jesús E. Sueiras  
**Congres:** XXI Iberoamericano de Catálisis (SICAT)  
**Títol:** Effect of microwaves on the surface and acidic properties of dealuminated mordenites  
**Lloc i data:** Benalmádena-Málaga, 2008

**Autors:** M. Reguero, I. Gómez, Y. Mercier, M. Segado  
**Congres:** MOLMAT-2008  
**Títol:** Tuning of the luminescent behaviour in systems with intramolecular charge transfer  
**Lloc i data:** Toulouse, França, Juliol 2008

**Autors:** Y. Mercier, I. Gómez, M. Reguero  
**Congres:** 6th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications – ESPA 2008  
**Títol:** Aminobenzonitrile and derivatives: influence of the substitution on the dual fluorescence  
**Lloc i data:** Palma de Mallorca, Juliol 2008

**Autors:** M. Segado, M. Reguero  
**Congres:** Time-Dependent Density-Functional Theory: Prospects and Applications  
**Títol:** Ab initio study of the mechanism of production of photosensitized singlet oxygen by means of phenalenone  
**Lloc i data:** Benasque, Setembre 2008

**Autors:** Aguado, S.; Bo, C.; Carbó, J.J.; Guasch, L.; Urbano-Cuadrado, M.  
**Congres:** 2<sup>nd</sup> EuCheMS Chemistry Congress  
**Títol:** Three-Dimensional DFT-Based QSSR Approaches as Computational Tools to Model Asymmetric Catalysis. Hydroformylation.  
**Lloc i data:** Torino (Italia), 2008

**Autors:** Anna Clotet, Carles Bo, Josep M. Poblet  
**Congres:** 6th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications - ESPA 2008  
**Títol:** Adsorption of polyoxometalates on metal surfaces: □-Keggin on Ag(100)  
**Lloc i data:** Palma de Mallorca, (Espanya), setembre 2008

**Autors:** M. Arasa; A. Serra; A. Mantecón; I. Vicente; P. Salagre; Y. Cesteros; F. Ferrando  
**Congres:** 4th International Symposium on Nanostructured and functional polymer-based materials and nanocomposites  
**Títol:** Preparation of nanocomposites by copolymerization reaction of DGEBA/g-VL initiated by Yb triflate using several clays  
**Lloc i data:** Roma (Italia, 2008)

**Autors:** B.T. Meshesha; A.M. Segarra, F. Medina ; J. E. Sueiras;; Y. Cesteros; P. Salagre  
**Congres:** 5th International Conference on Environmental Catalysis  
**Títol:** Alcali metal modified Pd-MgAlOx catalyst for hydrodechlorination of chloro-aromatic pollutants  
**Lloc i data:** Belfast (Reino Unido), 2008

**Autors:** X. Cardó; O.Bregada; M.D. González;l. Vicente; Y. Cesteros; P. Salagre; F. Medina; J. E. Sueiras  
**Congres:** International Symposium on Catalysis for Clean Energy and Sustainable Chemistry (CCESC)  
**Títol:** Use of microwave to prepare new catalysts with interesting properties for their use in catalysis for sustainable chemistry  
**Lloc i data:** Madrid, 2008

## **6.-Estades professors visitants**

Visita: 13 d'Abril – 8 de Maig de 2008  
Dr. Vincent Robert  
Ecole Superieure Normal de Lyon (França)

Visita:30-31 Octubre 2008  
Prof. Francisco Jaque.  
Departamento de Física de Materiales  
Universidad Autónoma de Madrid.

Visita: 7-17 Setembre, 2008.  
Prof. M.Dudley  
Brookhaven Synchrotron Laboratory  
State University of New York at Stone Brook (USA)

Visita: 16-19 Setembre, 2008.  
Prof. V. Petrov  
Max Born Institut  
Berlin (Germany)

Visita: 10-12 July, 2008  
Prof. Dominique Drouin  
Computer and Electrical Department  
University of Sherbrooke. Sherbrooke (Canada)

## **7.-Activitats de formació**

### **7.1- Post-Grau i formació permanent**

#### **Programes de doctorat i activitats de formació permanent**

El departament ha participat en:

- Programa de doctorat interdepartamental "Química en Processos i Productes Industrials" organitzat conjuntament amb el Departament de Química Analítica i Química Orgànica. Programa amb Menció de Qualitat.
- Programa de doctorat interuniversitari "Química Teòrica i Computacional". Programa amb Menció de Qualitat.
- Programa de doctorat interuniversitari "Catàlisi Homogènia". Programa amb Menció de Qualitat.
- Graduat superior en Dret Ambiental (Fac. de Ciències Jurídiques)
- Programa de doctorat lligat al POP "Ciència i Tecnologia Química" anomenat "Ciència i Tecnologia Química". Programa amb Menció de Qualitat.
- Curs de postgrau "Actualització Científico-Tècnica en la Indústria Petroquímica (ACTIP)"

El departament també ha participat amb col·laboració amb altres departaments de la URV, l'Institut Català d'Investigació Química (ICIQ), altres universitats i professors externs en els següents màsters:

- "Catàlisi"
- "Ciència i Enginyeria de Materials"
- "Química a la Indústria"
- "Arqueologia del Quaternari i Evolució Humana"
- "Methodology in Molecular Photochemistry"

#### **Matriculació:**

Alumnes matriculats en els doctorats del Departament:

- "Ciència i Tecnologies Química": 23 alumnes matriculats
- "Química en Processos i Productes Industrials": 7 alumnes matriculats
- "Química Teòrica i Computacional": 19 alumnes matriculats

### **7.2.-Tesis Doctorals**

4 tesis doctorals llegides durant el període del 2008, 3 de les quals amb títol Doctor Europeu.

1. **Autor:** Benjamí Martorell Masip  
**Títol:** Organic molecule on metal surfaces: forecasting structures and spectra  
**Director:** Anna Clotet Romeu  
**T.Doctor Europeu: Juny,2008**
2. **Autor:** Eva Santos García  
**Títol:** Computational studies on supramolecular H-bonded structures: from nanocapsules to proteins  
**Director:** Carles Bo  
**Juliol, 2008**
3. **Autor:** Alfons Nonell Canals  
**Títol:** QM and QM/MM studies on organic and bioinorganic systems  
**Director:** Feliu Maseras i Jordi Villa  
**T.Doctor Europeu:Octubre, 2008.**
4. **Autor:** Gerard Novell Lleruth  
**Títol:** Catalytic Ammonia Oxidation on Noble Metal Surfaces: A Theoretical Study  
**Director:** : Josep Manel Ricart Pla  
**T.Doctor Europeu: ,2008**

## **8.-Altres activitats**

### **8.1.-Conferències/ seminaris**

**Ponent:** Dr. Feliu Maseras

**Institució:** ICIQ

**Títol:** Algunos ejemplos de aplicación de métodos QM/MM a la Catálisis Homogénea

**Data:** 24-1-08

**Ponent:** Prof. Jairton Dupont

**Institució:** Laboratory of Molecular Catalysis Institute of Chemistry - UFRGS Porto Alegre Brasil

**Títol:** Ionic Liquid Multiphase Catalysis

**Data:** 18-2-08

**Ponent:** Dra. Laura Gagliardi

**Institució:** Universidad de Ginebra

**Títol:** Multiconfigurational quantum chemistry for transition metals and actinides

**Data:** 21-2-08

**Ponent:** Prof. Ira Weinstock

**Institució:** Ben Gurion University d'Israel

**Títol:** Molecular diffusion through nano-scale apertures of an oxomolybdate nanocluster

**Data:** 6-3-08

**Ponent:** Prof. Michael A. Robb

**Institució:** Imperial College de Londres

**Títol:** Theoretical Study of Methods for Controlling Photochemical Reactivity: Applications to Photochemical Mechanisms and Photostability

**Data:** 12-3-08

**Ponent:** Dr. Mario Blanco

**Institució:** California Institute of Technology

**Títol:** The future of nanosensing

**Data:** 13-3-08

**Ponent:** Dr. Vincent Robert

**Institució:** Ecole Normal Supérieure de Lyon

**Títol:** Low-Energy Inspection of Various Dimensionalities Systems

**Data:** 28-4-08

**Ponent:** Dra. Montserrat Gómez Simó

**Institució:** Univ. Paul Sabatier, Toulouse (França)

**Títol:** Aplicaciones químicas de los compuestos organometálicos a la catálisis homogénea

**Data:** 5-5-08

**Ponent:** Dra. Flor R. Siperstein

**Institució:** School of Chemical Engineering and Analytical Science, Manchester University

**Títol:** Modelling surfactant templated porous materials

**Data:** 15-5-08

## **8.2.-Divulgació**

Activa participació en l'organització de la Setmana de la Ciència. Col·laboració en les activitats de secundària. Xerrades de divulgació, conferències i jornades de portes obertes. Col·laboració en el cursos adreçats a la tercera edat.

### Jornada de Portes Obertes del Departament.

Dirigida principalment a alumnes de tercer i quart curs de la Llicenciatura en Química i en la que s'ha donat a conèixer els masters en els que el departament participa i les línies de recerca en les que es treballa actualment. 16 d'abril de 2008.

### Setmana de la Ciència

Participació en el muntatge del stand de la Facultat de Química de la URV i atenció al públic.

### Xerrades Gent Gran

- Francesc Díaz  
"Un futur levitant".

### Xerrades Secundària

- Yolanda Cesteros/ Pilar Salagre  
"Com funcionen els catalitzadors dels cotxes ?"

- Francesc Díaz  
"Superconductivitat: un futur levitant"

Jaume Massons  
"La Terra vista des de l'espai"  
"La predicció del temps"

- Xavier Ruiz  
"L'espai: ciència o ficció?"

- Núria Ruiz  
"Com fer un treball de recerca"  
"La química de les emocions"

- Joan Josep Carvajal  
"El món del làser"