

Memòria del departament de Química Física i Inorgànica  
Juny 2008- Maig 2009

Facultat de Química  
Universitat Rovira i Virgili

Mèmorria Recerca DQFI  
2008

Índex

1.	Direcció estratègica i de govern.....	3
2.	Qualitat i avaluació. Accions de millora i avaluació.....	3
3.	Comunicació i relacions externes. Convenis més importants .....	3
4.	Estructura personal .....	4
5.	Programes de doctorat i activitats de formació permanent .....	4
6.	Activitats de recerca i transferència .....	5
7.	Matriculació .....	5
8.	Tesis Doctorals .....	5
9.	Col·laboracions internacionals.....	7
10.	Patents .....	8
11.	Publicacions .....	8
12.	Conferències donades per científics visitants al departament .....	19
13.	Organització de congressos .....	20
14.	Innovació docent.....	21
15.	Visites .....	21
16.	Congresos.....	23
	Comunicacions orals .....	23
	Posters .....	23
17.	Projectes de finançament públic.....	24
18.	Activitats d'Extensió.....	38
19.	Beques.....	39

Memòria Departament de Química Física i Inorgànica  
Curs 2008-2009

Campus Sescelades – Marcel·lí Domingo, s/n – 43007 Tarragona  
Tel i fax 977 558 137 – 977 559 563

Dra. Anna Maria Masdeu i Bultó, directora

Dra. María del Mar Reguero de la Poza, secretària

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.

### **1. Direcció estratègica i de govern**

Durant aquest període, el Departament de Química Física i Inorgànica (DQFI) ha desenvolupat diferents accions que s'enquadren en els eixos definits per la Universitat.

### **2. Qualitat i avaluació. Accions de millora i avaluació**

En el marc del pla estratègic, el departament s'ha implicat amb profunditat en la preparació de la implantació del primer curs dels nous graus Química, Bioquímica i Biologia Molecular, Enologia i Biotecnologia participant activament en les corresponents comissions de planificació de les assignatures. L'aposta del departament per l'adaptació dels ensenyaments a l'espai europeu es posa de manifest en la participació activa dels professors en programes d'innovació docent i en els cursos de formació per al personal docent i investigador. Així mateix s'ha impulsat la utilització del Campus Virtual com a eina docent.

En aquest curs s'ha implantat el Pacte de Dedicació, tasca que ha suposat un repte ja que comporta un debat profund sobre la distribució de tasques als departament i com s'arriba a un acord a l'hora de valorar la participació de tot el personal implicat.

En altres camps d'actuació, és de destacar la certificació d'un laboratori més de recerca segons la norma ISO9001 amb la qual cosa només queda pendent un laboratori per certificar-se.

Un tema central per al departament és la Recerca i Transferència de Tecnologia. En aquest període s'han incrementat el nombre de projectes de recerca en els que participen grups de departament i s'han realitzat accions de captació d'estudiants de Màster i Doctorat (jornades de portes obertes, beques d'iniciació a la recerca).

### **3. Comunicació i relacions externes. Convenis més importants**

S'ha de destacar el gran nombre de col·laboracions dels grups de recerca del Departament amb altres institucions de recerca nacionals i internacionals, tal i com es veu reflectit en el gran nombre de publicacions compartides amb altres institucions. La mobilitat del personal investigador es veu afavorida amb l'existència d'aquestes col·laboracions.

En el camp de les col·laboracions s'han convidats diferents investigadors de prestigi i s'han mantingut les relacions amb l'ICIQ, tan a nivell de recerca com en temes docents, mitjançant la participació de l'Institut en assignatures del màster de Synthesis and Catalysis.

#### 4. 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
- Becaris Iniciació a la recerca (no-licenciats): 3
- Personal de suport de la recerca: 3
- Tècnics Informàtics: 2
- Tècnics de Laboratori: 2
- Administratius: 5
- Col·laboradors. Becaris PEQ: 2

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.

#### 5. Programes de doctorat i activitats de formació permanent

El departament ha participat en:

- Programa de doctorat lligat al POP "Ciència i Tecnologia Química" anomenat "Ciència i Tecnologia Química". Programa amb Menció de Qualitat.
- Graduat superior en Dret Ambiental (Fac. de Ciències Jurídiques)
- 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"

## 6. Activitats de recerca i transferència

### Centres 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 Catalúsi.
- **TecaT:** Centre d'Innovació Tecnològica en Desenvolupament de Catalitzadors per a Processos Sostenibles.

També es participa en les següents xarxes:

- 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.

Estructures de Recerca:

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

## 7. Matriculació

Alumnes matriculats en els doctorats del Departament:

- "Ciència i Tecnologies Química" : 25 alumnes matriculats
- "Química en Processos i Productes Industrials": 7 alumnes matriculats
- "Química Teòrica i Computacional" : 16 alumnes matriculats

## 8. Tesis Doctorals

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

1. **Autor:** Benjamí Martorell Masip  
**Títol:** Organic molecules 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**
- 5. Autor:** Susanna Romo del Amo  
**Títol:** Estudi teòric de propietats espectroscòpiques i electroquímiques de polixometalats amb metalls de transició dels grups 6-9  
**Director:** Josep Maria Poblet  
**Abril 2009**

## 9. Col·laboracions internacionals

1. C.N.R.S. Montpellier (França)
2. Universitat P. Sabatier, Toulouse (França)
3. Institute Néel – CNRS, Grenoble (França)
4. Institut Néel/CNRS–Université Joseph Fourier de Grenoble (França)
5. Laboratoire des Matériaux Inorganiques Université Blaise Pascal. Clermont Ferrand (França)
6. Université Louis Pasteur Strasbourg (França)
7. Università degli Studi di Milano-Bicocca (Itàlia)
8. Università degli Studi di Genova (Italia)
9. Dipartimento Scientifico e Tecnologico, Univ. Verona. (Italia).
10. Università de Trieste (Itàlia)
11. Imperial College, London (Regne Unit)
12. Dyson Perry Labs. Oxford (Regne Unit)
13. Materials and engineering research, Hallam University, Sheffield (Regne Unit)
14. University of Durham (Regne Unit)
15. University of Glasgow (Regne Unit)
16. University of California, Davis (USA)
17. Florida State University (USA)
18. Brookhaven Synchrotron Laboratory de la University State of New York (USA)
19. University of Clemson (USA)
20. Max Born Institute, Berlin (Alemanya)
21. University of Bielefeld (Alemanya)
22. Jacobs University Bremen (Alemanya)
23. RWTH Aachen University (Alemanya)
24. Advanced Photonics Laboratory, Institute of Imaging and Applied Optics, École Polytechnique Fédérale, Lausanne (Suïssa)
25. Laser physics, KTH – Royal Institute of Technology de Stockholm (Suecia)
26. Polish Academy of Sciences, Wroclaw (Polònia)
27. Queen's University (Canada)
28. Mount Alison University (Canada)
29. UNAM (Mexico)
30. University College Dublin (Irlanda)
31. University of Graz (Austria)
32. Academy of Science (Russia)
33. Abdelmalek Esaadi Tetuan (Marroc)
34. Universidad de Concepción (Chile)
35. Technische Universiteit Eindhoven (Holanda)

## 10. 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 sol·licitud:** 11/765,449  
**Pais:** Estats Units d'Amèrica  
**Entidad titular:** REPSOL YPF, S:A.

## 11. Publicacions

S'ha publicat, durant l'any 2008, 68 articles en revistes internacionals i s'han presentat un gran nombre de comunicacions a congressos nacionals i internacionals.

### 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 síntesis of carbamates  
**Revista:** Ind. Eng. Chem. Research, **2008**, 47, 8032-8036.
- **Autors:** B.T.Meshesha, R.J. Chimentao; F. Medina; J.E. Sueiras; Y. Cesteros; P. Salagre; F. Figueras  
**Títol:** Catalytic hydrodechlorination of 1,2,4-trichlorobenzene over Pd/Mg(Al)O catalysts  
**Revista:** . Applied Catalysis B: Environmental **2009**, 87, 70-77.



## 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. Gavalda, 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*, 7-15 .

- **Autors:** Silvestre, O.; Pujol, M.C.; Solé, R.; Bolaños, W.; Carvajal, J.J.; Massons, J.; Aguiló, M.; Díaz, F  
**Títol:** Ln<sup>3+</sup>: KLu(WO<sub>4</sub>)(2)/KLu(WO<sub>4</sub>)(2) epitaxial layers: Crystal growth and physical characterisation.  
**Revista:** Materials Science and Engineering B-Solid State Materials for Advanced Technology, **2008** *146*, 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>)(2) and KLu(WO<sub>4</sub>)(2) laser crystals ,  
**Revista:** Journal of Physics-Condensed Matter, **2008**, *20*, 34, 345219.
  
- **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>)(2) 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>)(2)-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>)(2),  
**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>)(2) 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:** Iumei 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  $\text{Yb}_{0.0054}\text{Y}_{0.3481}\text{Gd}_{0.6465}\text{VO}_4$  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  $\text{Yb}_{0.009}\text{Y}_{0.575}\text{Gd}_{0.416}\text{VO}_4$  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  $\text{Yb}:\text{Ca}_3(\text{NbGa})_{2-x}\text{Ga}_3\text{O}_{12}$  crystal under diode pumping at 974 – 976 nm  
**Revista:** Laser Physics Letters, **2008**, 5, 874-878.
  
- **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, Journal, **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.
  
- **Autors:** X. Ruiz, R. M. Solé, J. Gavaldà, J. Massons  
**Títol:** “Física per a les ciències de la vida. Problemes avançats”  
**Editorial:** Ed. Publicacions URV, Tarragona **2009**.

### **Organometàl·lics i Catàlisi Homogènia**

- **Autors:** C. Tortosa Estorach, M. Giménez-Pedros, 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:** 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.; Laurenczy, 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 hydrovinylation 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:** C. Claver, E. Fernandez  
**Títol:** Imino Reductions: Imine Hydrogenation  
**Llibre:** Modern Reductions Wiley-VCH, **2008**, 237-269.
- **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:** E. Fernandez, A. M. Segarra  
**Títol:** Iridium-catalyzed B-addition  
**Llibre:** Iridium Complexes in organic Synthesis, Wiley-VCH, **2008**.
- **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**, *14*, 10648-10655.

- **Autors:** Elena Fernández  
**Títol:** Catalytic tandem organic sequences through selective boron addition chemistry.  
**Revista:** *Pharma Chem*, **2008**, 8, 16-19.
  
- **Autors:** V. Lillo, A. Prieto, A. Bonet, M.M. Díaz Requejo, J. Ramírez, P. J. Pérez, E. Fernandez  
**Títol:** Asymmetric  $\beta$ -boration of  $\alpha$ ,  $\beta$  -unsaturated esters with chiral (NHC)Cu catalysts  
**Revista:** *Organometallics*, **2008**, 28, 659–662
  
- **Autors:** V. Lillo, A. Bonet, E. Fernandez  
**Títol:** Asymmetric induction on b-boration of a,b-unsaturated compounds: a cheap approach  
**Revista:** *Dalton Transaction*, **2008**,
  
- **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 C<sub>2</sub>-symmetrical phosphite ligand for enantioselective allylic substitution processes  
**Revista:** *Chemical Communications*, **2008**,
  
- **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, 24, 2759-2761.
  
- **Autors:** Muñoz-Moreno, Bianca K.; Claver, Carmen; Ruiz, Aurora; Bianchini, Claudio; Meli, Andrea; Oberhauser, Werner.  
**Títol:** Synthesis of palladium(II) complexes containing a new  $\alpha$ -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,, 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:** 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.

## 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.; Cimiraglia, 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. Poblet and Miquel Solà  
**Títol:** Chemical Reactivity of  $D_{3h}$  C<sub>78</sub> (Metallo)Fullerenes: Regioselectivity Changes Induced by Sc<sub>3</sub>N 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. Poblet, C. Bo, J. Bonet-Ávalos  
**Títol:** Keggin Polyoxoanions in Aqueous Solution: Ion Pairing and Its Effect on Dynamic Properties by Molecular Dynamics Simulations  
**Revista:** 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. Poblet  
**Títol:** On the Origin of Alternating Bond Distortions and the Emergence of Chirality in Polyoxometalate Anions  
**Revista:** 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-Forteza and Josep M. Poblet  
**Títol:** Understanding the Stabilization of Metal Carbide Endohedral Fullerenes M<sub>2</sub>C<sub>2</sub>@C<sub>82</sub> 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, **2008**, 5166-5172.
  
- **Autors:** Antonio Rodríguez-Forte, 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  $[\{\text{Ti}(\text{H}_5\text{-C}_5\text{Me}_5)(\mu\text{-O})\}_3(\mu_3\text{-CR})]$ . DFT elucidation of the reaction mechanism  
**Revista:** Chemistry-A European Journal, **2008**, 14, 7930-7938.
  
- **Autors:** Sarasa, J.P., Igual, J., Lazansky, L. Poble, J.M.  
**Títol:** Towards the precise calculation of  $^{183}\text{W}$  nmr chemical shifts in polyoxotungstates  
**Llibre:** Nato Workshop; eds. C. Hill, A. Müller, D. Musaev, Ed: Elsevier, **2008**.
  
- **Autors:** J.M. Poble, X. López  
**Títol:** Heteropolyoxoanions: computational methods  
**Llibre:** Encyclopaedia of Inorganic Chemistry: Book: Computational Inorganic and Bioinorganic Chemistry, eds. Robert Scott, Ed Solomon and Bruce King, Editorial Wiley-VCH, **2008**.
  
- **Autors:** González, M.D.; Cesteros, Y.; Salagre, P.; Medina, F.; Sueiras, J.E.  
**Títol:** Effect of microwaves in the dealumination of mordenite on its surface and acidic properties.  
**Revista:** Microporous and Mesoporous Materials, 118, 347, Amsterdam, **2009**.
  
- **Autors:** Meshesha, B.T.; Chimentão, R.J.; Medina, F.; Sueiras, J.E.; Cesteros, Y.; Salagre, P.; Figueras, F.  
**Títol:** Catalytic hydrodechlorination of 1,2,4-trichlorobenzene over Pd/Mg(Al)O catalysts.  
**Revista:** Applied Catalysis B-Environmental, **2009**, 87, 70-77.
  
- **Autors:** Vicente, I.; Salagre, P.; Cesteros, Y.; Guirado, F.; Medina, F.; Sueiras, J.E.  
**Títol:** Fast microwave synthesis of hectorite  
**Revista:** Applied Clay Science, **2009**, 43, 103-107.
  
- **Autors:** Clotet, A.; Martorell, B.  
**Títol:**  $\text{CH}_2\text{CHCH}$ : A key isomer of propyne. Adsorption structures and IR spectra on Cu(III)  
**Revista:** Journal of Physical Chemistry C, **2009**, 113, 950-964.



- **Autors:** Pinzón, J. R.; Cardona, C. M.; Herranz, M. A.; Plonska-Brzezinska, M. E.; Palkar, A.; Athans, A. J.; Martín, N.; Rodríguez-Forteza, A.; Poblet, J. M.; Bottari, G.; Torres, T.; Gayathri, S. S.; Guldi, D. M.; Echegoyen, L.  
**Títol:** Metal Nitride Cluster Fullerene  $M_3N@C_{80}$  (M=Y, Sc) based Dyads: Synthesis, and Electrochemical, Theoretical and Photophysical Studies  
**Revista:** Chemistry-A European Journal, **2009**, 15, 864-877.
  
- **Autors:** Tamoghna Mitra, Pere Miró, Adrian-Raul Tomsa, Alice Merca, Hartmut Bögge, Josep Bonet Àvalos, Josep M. Poblet, Carles Bo and Achim Müller  
**Títol:** Gated and Differently Structured (New) Porous Capsules Direct Encapsulates' Structures: "High and Low Density Water"  
**Revista:** Chemistry-A European Journal, **2009**, 15, 1844-1852.
  
- **Autors:** Manuel Chaur, Ramón Valencia, Antonio Rodríguez-Forteza, Josep M. Poblet, Luis Echegoyen  
**Títol:** Trimetallic Nitride Endohedral Fullerenes: Consistent Experimental and Theoretical Evidence for the  $M_3N_6^+@C_{2n_6}$ - Model  
**Revista:** Angewandte Chemie-International Edition, 48, **2009**, 1425-1428.

- **Autors:** Jorge J. Carbó, Octavio González-del Moral, Avelino Martín, Miguel Mena, J.M. Poblet and Cristina Santamaría  
**Títol:** Hydron Transfer Processes involving an Organotitanium Oxide and Alcohols  
**Revista:** European Journal of Inorganic Chemistry, **2009**, 643-653.
  
- **Autors:** F. Leroy, P. Miró, J. M. Poblet, C. Bo, J. Bonet-Ávalos  
**Títol:** Keggin Polyoxoanions in Aqueous Solution: Ion Pairing and Its Effect on Dynamic Properties by Molecular Dynamics Simulations  
**Revista:** Journal of Physical Chemistry B, **2008**, 112, 8591-8599.

## 12. Conferències donades per científics visitants al departament

9 de juny 2008, 9.30, Sala de Graus de la Facultat de Química  
Sra. Almudena Trapero, empresa Gomensoro.  
Seminari sobre Aplicacions de la Tecnologia Microones

Dilluns, 16 de juny 2008, 11:30h, Sala de graus de fac. Química  
Prof. Eduardo Peris Fajarnés, Universidad Jaume I, Castellón  
"Reactivity and catalytic properties of N-Heterocyclic carbene complexes.  
Mechanistic aspects of related C-H activation processes"

\*Dimecres, 17 de Setembre, 16:00h, Sala de Graus de la ETSE-ETSEQ  
Prof. Santiago Miguel Olaizola. Microsystems Unit, CEIT – IK4 Research Alliance,  
Donostia  
"Definición de estructuras submicrométricas mediante interferencia de pulsos laser de  
alta energía"

Dilluns, 6 de octubre, 10.00h, sala de graus.  
Johannes G. de Vries and André de Vries  
DSM Pharmaceutical Products. *Innovative Synthesis & Catalysis*. Geleen, The  
Netherlands  
"Asymmetric catalytic approaches to chiral amines"

Dimarts, 21 de octubre, 12.00h, sala de graus.  
Dra. Barbara Milani  
Dipartimento di Scienze Chimiche, Università di Trieste  
"From ligands to polymers in Pd-catalyzed polyketone synthesis: shedding light on  
catalyst stability and polymer structure"

Divendres 31 d'octubre, 10:15 h, Sala de Graus de la Facultat de Química  
Dr. Eduard Bardaji, Surochem SL & LIPPSO  
Departament de Química. Universitat de Girona  
"Chemically modified cork materials"

Divendres 31 d'octubre, 12 h, Sala de Graus de la Facultat de Química  
Prof. Francisco Jaque, Universidad Autónoma de Madrid  
"SNOM Studies on Photonic Structures"

12 December 2008, 12:00h, Sala de Graus de la Facultat d'Enologia (URV)  
Prof. Horia Metiu (Univ. of California at Santa Barbara, USA)  
The properties of small Au clusters in gas-phase and adsorbed on titania

22 Gener 2009, 12:00 h. Sala de Graus de la Facultat de Química.  
Dra. Sofia Calero, Universidad Pablo de Olavide, Sevilla.  
"Estudios de Procesos de Adsorción, Difusión y Catálisis en Zeolitas y otros Materiales  
Cristalinos Utilizando Simulación Molecular".

20 de Gener 2009, 12:00 h. Sala de Graus de la Facultat de Química.

Dr. Christian Muller, Technische Universiteit Eindhoven  
“Functionalized phosphinines aromatic heterocycles with many perspectives”

13 Febrer 2009, 12:00h, Sala de Graus de la Facultat de Química (URV)  
Prof. Ángel González Ureña, Instituto Pluridisciplinar, Universidad Complutense de Madrid  
“Laser photons and healthy fruit”

16 de Febrer a les 11:00, Sala de Graus de la Facultat de Química  
Prof. Juan Manuel García-Ruiz, Laboratorio de Estudios Cristalográficos del CSIC - Universidad de Granada  
“La formación de agregados cristalinos autoensamblados y el problema de la detección de vida primitiva”

17 de Febrer, 11:00h, Auditorium ICIQ  
Prof. Juan Manuel García-Ruiz, CSIC-Universidad de Granada  
“Crystalization in diffusive environments: gels, microfluidic and microgravity”

9 de Març, 12.00h Sala de Graus Enologia  
Prof. Paul C.J.Kamer, University of St Andrews (UK)  
“Biological Concepts in Homogeneous Catalysis; Towards Miniaturized Factories”

Dijous 26 Març 2009, 12.00 h, Sala Graus de la Facultat Química  
Prof. Mark R. Pederson, Naval Research Laboratory (Washington, DC, USA)  
“Density-Functional-Based Simulation of Light-Harvesting in an Organic Photovoltaic”

### **13. Organització de congressos**

#### **FAiC**

Participació en el Comité científic de “The 15th International Conference on Luminescence and Optical Spectroscopy of Condensed Matter (ICL’08)”

Membres del Grup de FAiC

Lyon, 7-11 July, 2008.

#### 14. Innovació docent

- Presentació de comunicació al Congrés Internacional d'Innovació Docent Universitària. Juliol 2008, Lleida. Drs J. Gavaldà i J. Massons.
- *La Dra N. Ruiz* ha impartit 1 curs "El dossier d'aprenentatge" el dimecres 4 de juny de 2008 dins de les activitats de formació per al PDI, PROFID 10
- La Dra. N. Ruiz ha estat membre del Comité Científic del V Congrés Internacional de Docència Universitària i Investigació (Lleida, juliol de 2008)
- Projecte d'innovació docent, concedit en la Convocatoria d'ajuts d'innovació docent 2008 URV, "Virtualització-experimentació al laboratori de Física: una alternativa a les pràctiques convencionals"  
Durada del Projecte: 1 de setembre 2008 – 30 de setembre 2009  
Coordinadors del Projecte: Fina Gavaldà i Martínez
- Impartició del taller "La carpeta de aprendizaje" a la Universitat de Múrcia dins del "Plan de Formación Permanente para el Profesorado de la Universidad de Murcia", 24 de març de 2009  
Núria Ruiz Morillas
- Coordinadora del projecte d'innovació docent "Aprender Química Bioinorgánica en un contexto científico i social: una experiència d'aprenentatge basat en problemes" concedit dins de la convocatòria de Projectes 2007/2008 de l'ICE-URV i que ha finalitzat el passat setembre de 2008.  
Núria Ruiz Morillas
- Implantació del títol propi de postgrau (Oferta Formació continuada):  
Especialista Universitari en Làser i les Seves Aplicacions en Dermatologia  
Director: Francesc Díaz González Dept. de Química, Física i Inorgànica  
ECTS: 20

#### 15. Visites

Professor Leonid Kazansky,  
Institute of Physical Chemistry, Academy of Science  
Moscow, Rusia  
2 setmanes, Febrer-09

Dr. Israël-Martyr Mbomekallé  
Institut LAVOISIER  
Versailles, França  
Del 14 al 24 d'Abril de 2009

#### Conferències en altres centres

Conferència als alumnes de la llicenciatura de Química a la Universidad Complutense de Madrid. "Compuestos organometálicos"  
Carmen Claver, 20 de Gener de 2009

Conferència a ITMC, RWTH Aachen University: "Challenges in Selective Catalysts: From Modular Ligands to Metal Nanoparticles"  
Carmen Claver, 10 de Febrer de 2009

Conferència a Campus CNRS 205, Toulouse (França) "Challenges in Asymmetric Catalysis: From Modular Ligands to Metal Nanoparticles"  
Carmen Claver, 14 d'Abril de 2009

Conference Invited stay at the Department of Physical Chemistry, Universitat de Ginebra

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

C. de Graaf, B. Ordejón, C. Sousa  
Ginebra, Suïssa, 2008.

“Reacciones tandem mediante secuencias de adición selectiva de boro” Universidad Elena Fernández,  
Huelva, Maig 2008.

“Catalytic tandem organic sequences through selective boron addition chemistry :” Scientific Update.  
Elena Fernández  
Vilamoura-Portugal, Mayo 2008

“Reacciones catalíticas consecutivas a través de la química del boro “ Universidad de Girona.  
Elena Fernández  
Girona, Febrero 2009.

Participació en el Master europeu “Theoretical chemistry and computational modelling”  
María del Mar Reguero.  
Setembre 2008

#### Distincions

Concesió de Càtedra “Chair Pierre de Fermat”, Toulouse a Carmen Claver  
6 mesos Maig-Juliol 2009-2010

#### Altres

Membre del Consell Assessor de la revista Educació Química (EduQ) de la Societat Catalana de Química, creada l'octubre de 2008  
Núria Ruiz Morillas

## 16. Congressos

### Comunicacions orals

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

**Títol:** Light-Induced Excited State Spin Trapping in Tetrazole-based Spin Crossover systems (keynote lecture)

**Congrès:** Conference EUCCO-CC7,

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

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

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

**Tipus de participació:** Oral Communication

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

**Lloc i data:** Rennes, Juliol 2008

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

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

**Tipo de participación:** Oral Communication

**Congrès:** XIII Imeboron

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

**Autors:** Mar Reguero, Isabel Gómez, Yannick Mercier, Mireia Segado

**Títol:** The intramolecular charge transfer studied using the CASSCF/CASPT2 method and the use of the QM/MM alternative

**Congrés:** Computational Chemistry 2009.

**Lloc i data:** Antigua, 18-21 de Març de 2009

### Posters

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

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

**Tipus de participació:** Poster

**Congrès:** 16th International Symposium on Homogeneous Catalysis

**Lloc i data:** Florencia, Juliol 2008.

**Autors:** Amadeu Bonet, Vanesa Lillo, Auxiliadora Prieto, Jesus Ramírez, M. Mar Díaz-Requejo, P. J. Perez, E. Fernández  
**Títol:** Cu-NHC mediates selective catalytic approach to boryl compounds

**Tipus de participació:** Poster

**Congrès:** XIII Imeboron

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

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

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

**Tipus de participació:** Poster

**Congrès:** XIII Imeboron

**Lloc i data:** Platja d'Aro, Setembre 2008.

## 17. 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</b>	Maria Pilar Salagre Carnero (investigador principal) Yolanda Cesteros (col·laboradora)
<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</b>	Yolanda Cesteros (Col·laboradora)
<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>	Recuperación de recursos hídricos contaminados con nitratos y nitritos mediante la tecnología de hidrogenación catalítica: escalado a planta piloto y de demostración
<b>Participació</b>	Pilar Salagre i Yolanda Cesteros (col·laboradores)
<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>	Preparación y estudio de las propiedades de nuevos materiales catalíticos, compuestos o disoluciones sólidas a base de óxidos
<b>Participació</b>	Maria Pilar Salagre Carnero (investigador principal) Yolanda Cesteros (col·laboradora)
<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>	Grup de materials catalítics
<b>Participació</b>	Maria Pilar Salagre Carnero i Yolanda Cesteros (col·laboradores)
<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>	Síntesis de isocianatos: Carbonilación oxidante de anilina con catalizadores de cobalto
<b>Participació</b>	Carmen Claver (investigador principal) Maria Pilar Salagre Carnero (col·laboradora)
<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>	PTR1995-0874-OP
<b>Data d'inici</b>	2006
<b>Finalització</b>	2008
<b>Anys de durada</b>	3

<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</b>	Pilar Salagre i Yolanda Cesteros (col·laboradores)
<b>Empresa</b>	Agencia Catalana del Agua
<b>Programa</b>	Contracte de transferència AMIC a Empresa
<b>Codi oficial</b>	J080055
<b>Data d'inici</b>	01/07/2008

<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)
<b>Empresa</b>	Griñol Ecologic S.L.U
<b>Programa</b>	Contracte de tranferència AMIC a Empresa
<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</b>	Pilar Salgre i Yolanda Cesteros (col·laboradores)
<b>Empresa</b>	Empresa Nacional de Residuos, S.A. (ENRESA).
<b>Programa</b>	Contracte de transferència AMIC a Empresa
<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</b>	Pilar Salgre i Yolanda Cesteros (col·laboradores)
<b>Empresa</b>	Manuel Vilaseca S.A
<b>Programa</b>	Contracte de transferència AMIC a Empresa
<b>Codi oficial</b>	J08002S
<b>Data d'inici</b>	17/03/2008
<b>Finalització</b>	20/09//2008
<b>Anys de durada</b>	

<b>Títol</b>	Construcción de una planta de eliminación de nitratos en el municipio del Morell.
<b>Participació</b>	Pilar Salagre i Yolanda Cesteros (col·laboradores)
<b>Empresa</b>	Aplicacions de la Catàlisi, S.L
<b>Programa</b>	Contracte de transferència AMIC a Empresa
<b>Codi oficial</b>	J07008S
<b>Data d'inici</b>	19/12/2007
<b>Anys de durada</b>	1

<b>Títol</b>	Intensificació a la dedicació de les activitats d' investigació del personal docent i investigador de la URV
<b>Participació</b>	Yolanda Cesteros,
<b>Organisme</b>	URV
<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>	Utilización de microondas en la preparación de nuevos catalizadores para su aplicación en procesos de revalorización de la glicerina
<b>Participació</b>	Maria Pilar Salagre Carnero, Yolanda Cesteros Fernández, Eliana Ramírez Rangel, Isabel Vicente Valverde, Maria Dolores González Candela. (col·laboradors)
<b>Organisme</b>	MEDU - Ministerio de Educación y Ciencia
<b>Programa</b>	AQMC - Área ANEP de química
<b>Codi oficial</b>	CTQ2008-04433
<b>Data d'inici</b>	01/01/2009
<b>Anys de durada</b>	3

<b>Títol</b>	Obtención de policarbonatos por procesos de bajo impacto ambiental
<b>Participació</b>	Anna Maria Masdeu Bultó, Aranzazu Orejón Álvarez, Ali Aghmiz, A
<b>Organisme</b>	MAE - Ministerio de Asuntos Exteriores
<b>Programa</b>	PCII - Programas de Cooperación Interuniversitaria e Investigación Científica
<b>Codi oficial</b>	A/015931/08
<b>Data d'inici</b>	10/01/2009
<b>Anys de durada</b>	1

## Física i Cristal·lografia de Materials

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

<b>Títol</b>	Grup de Física i Cristal·lografia de Materials. 2005
<b>Participació</b>	Francisco M. Díaz González (investigador principal) Massons, J.; Gavaldà, J.; Solé, R.M.; Pujol , M.C., Aguiló, M. (col·laboradors)
<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>	Nuevos desarrollos de materiales cristalinos laser y no-lineales para la demanda actual de las tecnologías fotónicas
<b>Participació</b>	Francisco Manuel Díaz González (investigador principal) Massons, J.; Gavaldà, J.; Solé, R.M.; Pujol , M.C., Aguiló, M. (col·laboradors)
<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</b>	Francisco Manuel Díaz González (investigador principal) Solé, R.M.; Pujol , M.C., Aguiló, M. (col·laboradors)
<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 $MLn(PO_3)_4$ , $MLnP_4O_{12}$ , y $LnP_5O_{14}$ (donde $M=Li, K, Na$ y $Rb$ ); $Ln=Y$ y elementos lantánidos
<b>Participació</b>	Magdalena Aguiló Díaz (investigador principal) Díaz, F., Solé, R.M.; Pujol Baiges, M.C. Carvajal, J.J., Mateos, X (col·laboradors)
<b>Organisme</b>	Agencia Espanyola de Cooperación Internacional.
<b>Programa</b>	Acciones integradas
<b>Codi oficial</b>	A/012814/07
<b>Data d'inici</b>	15/12/2007
<b>Anys de durada</b>	1

<b>Títol</b>	Obtenció de nanoceràmiques per aplicacions fotòniques ( Equip finançat: Cambra d'alta Temperatura)
<b>Participació</b>	Magdalena Aguiló Díaz (investigador principal) Díaz, F, Pujol Baiges, M.C. Carvajal, J.J.,(col·laboradors)
<b>Organisme</b>	Direcció General de Recerca
<b>Programa</b>	PEIR
<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>	Contracte entre el Departament d'Economia i Finances de la Generalitat de Catalunya i la FURV per l'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)
<b>Programa</b>	Contracte amb empresa
<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)
<b>Organisme</b>	SORISA
<b>Programa</b>	Contracte empresa pyme. Espanya
<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)
<b>Organisme</b>	MONOCROM S.L
<b>Programa</b>	Contracte empresa pyme. Espanya
<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)
<b>Organisme</b>	Empresa Nacional de Residuos Radioactivos, S.A. (ENRESA)
<b>Programa</b>	Contracte empresa gran. Espanya
<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)
<b>Organisme</b>	FURV-Asesoría Gestión Servicios de Ingeniería y Gestión Medioambiental S.A.L. (ASIGMA).
<b>Programa</b>	Contracte amb empresa
<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)
<b>Organisme</b>	FURV- Departament d'Economia i Finances de la Generalitat de Catalunya
<b>Programa</b>	Contracte amb empresa
<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.Diaz (col·laborador)
<b>Organisme</b>	FURV- Departament d'Economia i Finances de la Generalitat de Catalunya
<b>Programa</b>	Contracte amb empresa
<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.Diaz (col·laborador)
<b>Organisme</b>	FURV- Departament d'Economia i Finances de la Generalitat de Catalunya
<b>Programa</b>	Contracte amb empresa
<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.Diaz (col·laborador)
<b>Organisme</b>	FURV- Departament d'Economia i Finances de la Generalitat de Catalunya
<b>Programa</b>	Contracte amb empresa
<b>Codi oficial</b>	T08167S
<b>Data d'inici</b>	2008
<b>Anys de durada</b>	1

## Organometàl·lics i Catàlisi Homogènia

<b>Títol</b>	Reacciones de carbonilación en disolventes de bajo impacto ambiental
<b>Participació</b>	Anna Maria Masdeu Bultó (investigadora principal) Núria Ruiz i Arantxa Orejón (col·laboradores)
<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>	Organometàl·lics i Catàlisi Homogènia
<b>Participació</b>	Maria Carmen Claver Cabrero
<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>	Nanoconficat – Confinement de nanoparticules métalliques dans des nanotubes de carbone: vers des catalyseurs hautement sélectifs
<b>Participació</b>	Anna M. Masdeu (investigador principal) Núria Ruiz i Arantxa Orejón (col·laboradores)
<b>Organisme</b>	Agence Nationale de la Recherche (Francia),
<b>Programa</b>	ANR
<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</b>	Dra. Elena Fernández
<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>	Diseño de catalizadores para una Química sostenible: una aproximación integrada (INTECAT).
<b>Participació</b>	Maria del Carmen Claver Cabrero Cyril Godard (col·laborador)
<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>Quantia</b>	



<b>Títol</b>	Nuevas estrategias en catalisis asimetrica con metales de transición (NECAMT)
<b>Participació</b>	Maria del Carmen Claver Cabrero (investigadora principal) Montserrat Dieguez, Aurora Ruiz, Oscar Pàmies (col·laboradors)
<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>	Diseño de catalizadores metálicos para reacciones de hidroboración y diboración asimétricas: Funcionalización selectiva de moléculas objetivo
<b>Participació</b>	Maria Elena Fernández Gutierrez (investigadora principal)
<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</b>	Anna Maria Masdeu Bultó (investigadora principal) Núria Ruiz, Arantxa Orejón (col·laboradores)
<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>	Sintesi enantioselectiva d'amines d'interés farmacèutic
<b>Participació</b>	Maria del Carmen Claver Cabrero (investigadora principal)
<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</b>	Anna Maria Masdeu Bultó (investigadora principal) 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</b>	Maria del Carmen Claver Cabrero
<b>Organisme</b>	UROV - Universitat Rovira i Virgili
<b>Programa</b>	Col·laboració 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>	Síntesis de isocianatos: Carbonilación oxidante de anilinas con catalizadores de cobalto
<b>Participació</b>	Maria del Carmen Claver Cabrero
<b>Organisme</b>	CICY - Comisión Interministerial 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>	25/08/2005
<b>Anys de durada</b>	3

<b>Títol</b>	Intensificació a la dedicació de les activitats d' investigació del personal docent i investigador de la URV
<b>Participació</b>	Elena Fernández
<b>Organisme</b>	URV
<b>Programa</b>	General de intensificació de la investigació
<b>Codi oficial</b>	PGIR2008
<b>Data d'inici</b>	01/09/2008
<b>Anys de durada</b>	3

<b>Títol</b>	Intensificació a la dedicació de les activitats d' investigació del personal docent i investigador de la URV
<b>Participació</b>	Montserrat Diéguez
<b>Organisme</b>	Generalitat de Catalunya
<b>Programa</b>	General de intensificació de la investigació
<b>Codi oficial</b>	PGIR2008
<b>Data d'inici</b>	01/09/2008
<b>Anys de durada</b>	3

<b>Títol</b>	Intensificació a la dedicació de les activitats d' investigació del personal docent i investigador de la URV
<b>Participació</b>	Óscar Pàmies
<b>Organisme</b>	Generalitat de Catalunya
<b>Programa</b>	General de intensificació de la investigació
<b>Codi oficial</b>	PGIR2008
<b>Data d'inici</b>	01/09/2008
<b>Anys de durada</b>	3

<b>Títol</b>	Síntesis de materias primas e intermediarios de aplicación en cosmética y ceras
<b>Participació</b>	Dra. Elena Fernández
<b>Empresa</b>	Mystar S.L.
<b>Programa</b>	Contracte amb empresa
<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 (investigadora principal) Cyril Godard (col·laborador)
<b>Empresa</b>	RYPF - Repsol YPF S.A
<b>Programa</b>	0EGT - Contracte empresa gran. Espanya
<b>Codi oficial</b>	N07002S
<b>Data d'inici</b>	2007
<b>Anys de durada</b>	1

## Química Quàntica

<b>Títol</b>	Suport als Grups de Recerca de Catalunya: Grup de Química quàntica
<b>Participació</b>	Rosa Caballol Lorenzo (investigadora principal) Josep Maria Poblet, Josep Manel Ricart, Joan Igual, Anna Clotet, Mar Reguero, Coen de Graaf, A Rodriguez, Joan Carbó (col·laboradors)
<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>	Modelización ab initio a escala molecular, nanoscópica y macroscópica de materiales de interés tecnológico
<b>Participació</b>	Rosa Caballol Lorenzo (investigadora principal) Josep Manel Ricart, Joan Igual, Anna Clotet, Mar Reguero, Coen de Graaf (col·laboradors)
<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</b>	Josep Maria Poblet Rius (investigador principal) Joan Igual, Joan Carbó i Antonio Rodriguez (col·laboradors)
<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>	Estructura electrònica i intercanvi d'ions en nanocapsules d'òxids moleculars
<b>Participació</b>	Josep Maria Poblet (investigador principal) Joan Carbó i Antonio Rodriguez, Carles Bo (col·laboradors)
<b>Organisme</b>	URV - Universitat Rovira i Virgili
<b>Programa</b>	Col·laboració amb ICIQ
<b>Codi oficial</b>	2007URV-ICIQ-01
<b>Data d'inici</b>	22/11/2007
<b>Anys de durada</b>	3

<b>Títol</b>	Xarxa de referència d'R+D+I en Química Teòrica i Computacional
<b>Participació</b>	Josep Maria Poblet, Josep Manel Ricart, Joan Igual, Anna Clotet, Mar Reguero, Coen de Graaf, A Rodriguez, Joan Carbó (col·laboradors)
<b>Organisme</b>	Departament d'innovació, Universitats i Empresa, Generalitat de Catalunya
<b>Programa</b>	Xarxes de referència
<b>Codi oficial</b>	N.I.
<b>Data d'inici</b>	2006
<b>Anys de durada</b>	3

<b>Títol</b>	Descripción ab initio de los estados excitados en materiales moleculares y extendidos
<b>Participació</b>	Cornelis de Graaf, (investigador principal) Rosa Caballol Lorenzo, Maria del Mar Reguero de la Poza, Javier López Fernández, Maria Àngels Carvajal Barba. (col·laboradors)
<b>Organisme</b>	MEDU - Ministerio de Educación y Ciencia
<b>Programa</b>	AQMC - Área ANEP de química
<b>Codi oficial</b>	CTQ2008-06644-C02-01
<b>Data d'inici</b>	01/01/2009
<b>Anys de durada</b>	3

<b>Títol</b>	De complejos monometálicos a clusters polinucleares y superficies metálicas: aplicaciones en catálisis y nanociencia
<b>Participació</b>	Josep Maria Poblet Rius, (investigador principal) Jose Manuel Ricart Pla, Anna Maria Clotet Romeu, Antonio Rodríguez Fortea, Jorge Juan Carbó Martín, Javier López Fernández. (col·laboradors)
<b>Organisme</b>	MEDU - Ministerio de Educación y Ciencia
<b>Programa</b>	AQMC - Área ANEP de química
<b>Codi oficial</b>	CTQ2008-06549-C02-01
<b>Data d'inici</b>	01/01/2009
<b>Anys de durada</b>	3

## 18. Activitats d'Extensió

### Divulgació

#### Seminaris a Aules d'Extensió Universitària per la Gent Gran.

Un món de làsers (Joan Josep Carvajal): 6  
La Bombolla Immobiliària (Xavier López): 1  
L'efecte hivernacle i el canvi climàtic (Jaume Massons): 3  
Astronàutica (Xavier Ruiz): 9

#### Seminaris a la Antena del Coneixement

La URV cap a l'EEES. El procés de Bolonya (Josep Manel Ricart): 2

#### Seminaris a Centres de Secundària

La química de les emocions (Núria Ruiz): 9  
Com fer un treball de recerca? (Núria Ruiz): 9  
La Terra vista des de l'espai (Jaume Massons): 6  
L'efecte hivernacle (Jaume Massons): 8  
Superconductivitat: un futur levitant (Francesc Díaz): 3  
Com funcionen els catalitzadors del cotxes? (Pilar Salagre, Yolanda Cesteros): 1  
El món del làser (Joan Josep Carvajal): 3  
La conquesta de l'espai: ciència o ficció? (Xavier Ruiz): 2  
Escollir fer ciència (Laia Vilà): 2  
Química farmacèutica: la química que s'amaga darrera un medicament (Amadeu Bonet): 1  
Del més gran al més petit, un nanomón per explorar (Montserrat Galceran): 8  
La URV cap a l'EEES. El procés de Bolonya (Josep Manel Ricart): 3

#### Altres activitats relacionades amb Secundària

Demostracions (4) de la pràctica de "la pila química" a grups d'estudiants de secundària.  
Antonio Rodríguez Fortea

### **Organització de la fase local de l'Olimpíada Química de Catalunya.**

Josep Manel Ricart

### **Participació en l'organització de l'Olimpíada Física de Catalunya.**

Jaume Massons

### **Trobada joves investigadors**

Presentació de la recerca desenvolupada pels investigadors joves dels departaments  
Trobada organitzada juntament amb el Departament QAQO. 1 Juliol-08

### **Setmana de la Ciència**

Participació en el muntatge del stand de la Facultat de Química de la URV i atenció al públic. Novembre 2008

**Participació de l'Estructura de Recerca E+ amb diferents experiments.** Novembre 2008. Obtingut un premi de divulgació que atorga la URV dotat en 10.000€ per realitzar activitats de divulgació durant l'any 2009.

### **Saló de l'ensenyament**

Participació del FiCMA en l'Espai Ciència i Tecnologia dins el marc del Saló de l'Ensenyament 2009. Exposició: "Els materials superconductors i la levitació superconductora"

18-22 de març de 2009.

### **Enginy.cat**

Participació del FiCMA en l'espai EnginyCat del Col·legi d'Enginyers de Barcelona en l'Espai Ciència i Tecnologia dins el marc del Saló de l'Ensenyament 2009.

Activitat presentada: "Els cristalls làser i la seva aplicació".

19 de març de 2009

**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. 22 d'abril de 2009.

### **Jornades de Química Verda**

Dirigida als alumnes de tots els cursos de la llicenciatura en Química i en Bioquímica en la que s'han realitzat tot un conjunt d'activitats: conferència, visita a empreses, gimcana, taula rodona i documental, encaminades a fomentar una pràctica de la Química basada en els 12 principis de la Química Verda. 28-30 d'abril de 2009.

## **19. Beques**

### **Beques d'iniciació a la recerca:**

Jose Luis Ramos Martínez.

15-Setembre-2008 – 15-Març-2009

Cristina Pubill Ulldemolins.

1-Setembre-2008 – 29-Febrer-2009

### **Beques-colaboración del Ministerio de Educación, política social y deporte.**

Andreu Mestre 1-Febrer-2009 – 30-Juny-2009

Núria Alegret 1-Febrer-2009 – 30-Juny-2009

Cristina Soler 1-Febrer-2009 – 30-Juny-2009