

**DEPARTAMENT  
DE QUÍMICA  
DE LA UAB**

**MEMÒRIA DE RECERCA**

**2009**

## **INDEX**

### **1. Presentació**

### **2. Personal del departament**

Taula d'abreviacions

Personal acadèmic doctor i investigador en formació

Química Analítica

Química Física

Química Inorgànica

Química Orgànica

Professors i investigadors visitants

Personal d'administració i serveis

Personal d'administració

Personal tècnic de laboratori

### **3. Activitat Científica**

Grups de recerca

Grups de recerca consolidats

Grups de recerca emergents

Projectes d'investigació

Resum de financiació de la recerca

Publicacions

Llibres

Capítols de llibre

Articles

Treballs de recerca (Doctorat)

Tesis Doctorals

Organització de congressos

Conferències impartides

Conferències plenàries en congressos

Conferències en centres de recerca i jornades científiques

Premis rebuts

Conferències del departament impartides a la UAB

Estades a l'estranger

Resum de les activitats de recerca 2009

## **I. PRESENTACIÓ**

El Departament de Química de la UAB agrupa les àrees de química analítica, química física, química inorgànica i química orgànica. El personal docent i investigador està format per 90 doctors i 195 estudiants de màster i doctorat, que es complementa amb 10 persones d'administració i 6 tècnics de laboratori.

El curs 2008-09 ha impartit 14.100 hores de docència de Graus i Màsters Oficials en 12 titulacions. D'altra banda, participa en diversos estudis de doctorat, tots ells reconeguts amb menció de qualitat.

És també un departament amb força dedicació a la recerca, tant bàsica com aplicada, i a la transferència de coneixements i tecnologia. Prova d'això és el contingut d'aquesta memòria que recull les activitats portades a terme l'any 2009.

## **I. PERSONAL DEL DEPARTAMENT**

### **2.1 PERSONAL ACADÈMIC DOCTOR I INVESTIGADOR EN FORMACIÓ**

#### **TAULA D'ABREVIACIONS**

AA	Auxiliar Administratiu/va	PEL	Professorat Emèrit Laboral
Ad	Administratiu/va	PEP	Professorat Emèrit (Pla d'Emeritatge)
AF	Ajudant de Facultat	RyC	Investigador/a Ramón y Cajal
AL	Professorat Associat Laboral	FPU	Beques FPU
ASR	Auxiliar de Suport a la Recerca	TD	Tecnòleg Docent
BBP	Beca Beatriu de Pinós	TEL	Tècnic/a Especialista Laboral
BPD	Beca Pròpia de Departament	TESR	Tècnic/a Especialista de Suport a la Recerca
CU	Catedràtic d'Universitat	TML	Tècnic/a Mitjà Laboral
FPI	FPI Beques MEC	TSSR	Tècnic/a Superior de Suport a la Recerca
Ge	Gestora departamental	TU	Titular d'Universitat
JdC	Investigador Juan de la Cierva	I	A càrrec de conveni
LT	Professorat Lector	I6	Becari/a adscrit a projecte
LUC	Ajudant LUC	30	Beques UAB
PAL	Professorat Agregat Laboral	I00	FI-Generalitat de Catalunya (DGU)
PDU	Postdoctoral UAB		

## 2.1.1. QUÍMICA ANALÍTICA

### Personal Acadèmic Doctor

Alcalà Bernàrdez, Manel	LUC	Gené Torrabadella, Jordi	TU
Alegret Sanromà, Salvador	CU	Iturriaga Martínez, Hortensia	PEL
Alier Uriach, Santiago	AL	López Mesas, Montserrat	LT
Alonso Chamorro, Julián	CU	Macanas De Benito, Jorge	BBP
Alonso Sánchez, Agustín	AL	Maspoch Andrés, Santiago	CU
Baeza Labat, María del Mar	LT	Merkoçi Hyka, Arben	JdC
Bartrolí Molins, Jordi	CU	Muñoz Tapia, Maria	TU
Blanco Romia, Marcel	CU	Muraviev , Dmitri	VL
Céspedes Mulero, Francisco	PAL	Palet Ballús, Cristina	TU
Coello Bonilla, Jordi	CU	Pivodori Gurgo, María Isabel	LT
del Valle Zafra, Manuel	TU	Puy Marimón, Neus	AL
Esplandiú Egido, Maria José	RYC	Tarin Manubens, Pere	AL
Fàbregas Martínez, Esteve	TU	Valiente Malmagro, Manuel	CU

### Personal investigador en formació

Alonso González, Amanda	100	Jimenez Solano, Rubén	PIF
Alonso Sánchez, Agustí	I	Liébana Girona, Susana	PIF
Arruabarrena Gamboa, Julen	PIF	Mimendia Sancho, Aitor	PIF
Baltrons Rosell, Oriol	FPI	Morillo Martín, Diego	I
Bastos Arrieta, Julio Alonso	PIF	Olivé Monllau, Rosa Maria	PIF
Blanco Lucena, Francisco	FPI	Ortiz Alias, Pilar	I
Bonanni , Alessandra	30	Pacios Pujado, Maria Merce	FPI
Cairos Barreto, Carlos	FPI	Peralta Salvador, Elena	I
Candela Soto, Angélica María	I	Pérez López, Briza	30
Cetó Alceda, Xavier	FPI	Pérez Rafael, Sandra	PIF
Cueva Mestaza, Rubén	PIF	Rosas Portugal, Guillermo	PIV
Fernández Fernández, Eva	PIF	Ruiz Nicolas, Patricia	PIF
González Guevara, Johannes Luis	100	Tavares Couceiro, Pedro Nuno	PIF
Guerrero López, Beatriz	PIF	Wilson Masso, Deivy	30
Guix Noguera, Maria	PIF	Zamora Zamora, David	PIF

## 2.1.2. QUÍMICA FÍSICA

### Personal Acadèmic Doctor

Ayllón Esteve, José Antonio	TU	Marechal, Jean-Didier Pierre	LT
Bellarosa, Luca	PDU	Maseras Cuní, Feliu	TU
Branchadell Gallo, Vicenç	TU	Moreno Ferrer, Miquel	CU
Domènech Antúnez, Xavier	CU	Oliva Cuyàs, Antoni	CU
Gallardo García, Iluminada	CU	Peral Pérez, José	TU
Garcia Viloca, Mireia	PAL	Pérez Mirón, Javier	LUC
Gelabert Peiri, Ricard	PAL	Puig Àlvarez, Eduard	AL
González Lafont, Àngels	TU	Rodríguez Santiago, Luis Aurelio	TU
Guirado López, Gonzalo	LT	Sodupe Roure, Mariona	CU
Kovacks, Gabor	JdC	Solans Monfort, Xavier	RYC
Lledós Falcó, Agustí	CU	Tomàs Amella, Jaume	AL
Lluch López, Josep Maria	CU	Ujaque Pérez, Gregori	PAL

### Personal Investigador en Formació

Ali Torres, Jorge Isaac	FPI	Musso , Federico	PDU
Arasa Puig, Eva	PIF	Nadal Ferret, Marc	PIF
Bagan Navarro, Xavier	PIF	Nuñez Zarur, Francisco	PIF
Comas Vives, Aleix	FPU	Peguero Gutiérrez, Ana	PIF
da Silva Cruz, Hugo Gonçalo	FPI	Prats Alvarez, Gemma	PIF
Estruga Ortiga, Marc	FPI	Ramírez Anguita, Juan Manuel	PIF
Garcia Melchor, Maximilià	PIF	Serra Clusellas, Anna	FPU
Gorrea Morral, Esther	PIF	Soler Turu, Lluís	PIF
Moncho Escrivà, Salvador	FPI	Toledo Carvajal, Lea Natalia	FPI
Montserrat Gironès, Sergi	FPU	Villa Gomez, Katherine	PIF

### 2.1.3. QUÍMICA INORGÀNICA

#### Personal Acadèmic Doctor

Bayón Rueda, Joan Carles	CU	Llobet Dalmases, Antoni	CU
Bofill Arasa, Roger	LT	Montoya García, Vanessa	AL
Capdevila Vidal, Maria Mercè	TU	Palacios Bonilla, Oscar	LT
Casabó Gispert, Jaume	PEP	Pons Picart, Josefina	TU
Escriche Martínez, Luis	TU	Real Obradors, Juli	TU
Flor Pujadas, Teresa	TU	Ros Badosa, Josep	CU
Franco Puntès, Victor	AL	Sola Casadevall, Joan	TU
García-Antón Aviñó, Jordi	LT	Suades Ortuño, Joan	CU
González Duarte, Pilar	PEP	Yáñez López, Ramón	TU

#### Personal Investigador en Formació

Aguiló Carreras, Joan	PIF	Orihuela Garcia, Rubén	PIF
Cadevall Riera, Miquel	PIF	Peral Crespo, Daniel	PIF
Cueva Mestanza, Rubén Eduardo	PIF	Pérez Mirabet, Leonard	PIF
Espinal Navarro, Mònica	FPI	Pérez Rafael, Silvia	PIF
Francás Forcada, Laia	BPD	Pérez Zuñiga, Catalina	PIF
Gómez Villarraga, Fernando	PIF	Rivas Torcates, Lourdes	PIF
Guerrero Hernández, Miguel	100	Tello López, Ignacio	PIF
Lecina Vicente, Joan	PIF	Tomas Giner, Mireia	PIF
Luque Corredera, Carlos	PIF	Solano Minuesa, Eduardo	PIF
Martínez Cuevas, Francisco Javier	PIF	Vallcorba Valls, Oriol	30
Muñoz Hernández, Sergio	PIF		

### 2.1.4. QUÍMICA ORGÀNICA

#### Personal Acadèmic Doctor

Alibés Arqués, Ramon	TU	Jaime Cardiel, Carles	CU
Bayón Rueda, Juan Pablo	LT	March Centelles, Pere de	CU
Blanco Tort, Belén	AL	Marquet Cortés, Jordi	CU
Bourdelande Fernández, José Luis	CU	Ortuño Mingarro, Maria Rosa	CU
Busqué Sánchez, Félix	RYC	Parella Coll, Teodor	AL
Faggi , Enrico	PDU	Pleixats Rovira, Roser	CU
Figueredo Galimany, Marta	CU	Sánchez Ferrando, Francesc	PEP
Font Cierco, Josep	CU	Sebastián Pérez, Rosa María	PAL
Guirado López, Gonzalo	LT	Shafir , Alexandr	RYC
Hernando Campos, Jordi	PAL	Vallribera Massó, Adela	TU
Illa Soler, Ona	LT	Virgili Moya, Albert	CU

### Personal Investigador en Formació

Alonso Fernández, Javier	100	Mejías Ruiz, Nereida	PIF
Bardaji Valls, Nuria	PIF	Mendizábal Zalakain, Julen	PIF
Borja Rodríguez, Guadalupe	100	Miralles Lluma, Rosa	PIF
Celis Rodríguez, Sergio	PIF	Monge Marcet, Amalia	FPU
Ferrer Mallofre, Eric	100	Monteagudo Soldevilla, Eva	PIF
Figueras Sorinas, Antoni	FPU	Niembro Puiggené, Sandra	FPU
Fresneda Quesada, Miguel Angel	PIF	Planellas Oates, Marc	PIV
Garcia Bardaji, Gisela	100	Recasens Bonet, Josep	FPU
González Gálvez, David	FPU	Salabert Sabaté, Jordi	PIF
Gutiérrez Abad, Raquel	100	Sánchez Sánchez, Rafael	PIF
Hincapié Ruiz, César Augusto	PIF	Sangüesa Amoros, Marta	PIF
Lecina Vicente, Joan	PIF	Soto Hernandez, Marc	PIF
Lejeune, Guillaume	PIF	Toribio Villarroya, Gladys	FPU
Martín Sánchez, Laura	FPI		

## 2.2. PROFESSORS I INVESTIGADORS VISITANTS

<u>Nom</u>	<u>Institució</u>	<u>País d'origen</u>	<u>Període</u>
Agostini Valle, Eliana Maira	Universidad de Sao Paulo	Brasil	01-Set-2009 / 31-jul-2010
Arslançan, Serra	Universitat de Instambul	Turkia	10-set-2009 / 16-feb-2010
Brasil de Oliveira Marques, Paulo Roberto	Universidade Estadual Paulista (UNESP)	Brasil	20-Feb-2008 / 09-Jul-2009
Carvalho Benites, Filipa Alex.	Universidade do Porto	Portugal	02-Mar-2008 / 31-Mai-2009
Cruz Sousa Braga, Catarina	Universidade do Porto	Portugal	01-Mar-2008 / 31-Mai-2009
Douet, Aurélie	Université d'Orléans	França	20-Abr-2009 / 17-Jul-2009
Faggi, Enrico	Università Degli Studi di Firenze	Italia	16-Jun-2008 / 15-Jun-2009
Ferreira Ascensão, Joana	Universidade do Porto	Portugal	01-Mar-2008 / 31-Mai-2009
Gonçalves Fenga, Paula	Universidade Estadual Paulista	Brasil	01-Set-2008 – 28-Feb-2009
Gutiérrez Salgado, Juan Manuel	CINVESTAV, IPN	Méxic	19-Mar-2008 / 19-Mar-2009
Lans Vargas, Isaias	Universidad de Zaragoza	Espanya	08-Set-2008 / 15-Jun-2009
Liu, Chao	Shanghai Institute of Organic Chemistry	Xina	15-Des-2008 / 14-Des-2010
Marcel, Charlotte	Université d'Orléans	França	20-Abr-2009 / 17-Jul-2009
Massaad, Julie	Université Paul Sabatier	França	21-Oct-2009 / 30-Oct-2009
Merlo, Roberto	Università degli studi di Padova il Bo	Italia	05-Mar-2009 / 30-Set-2009
Moncomble, Aurélien	École Polytechnique, Palaiseau	França	01-Set-2009 / 30-Set-2009
Nicolas, Dellus	Université Paul Sabatier	França	06-Oct-2009 / 30-Nov-2009
Oliveira Fonseca, Claudia	Universidade do Porto	Portugal	02-Mar-2008 / 31-Mai-2009
Pereira Monteiro, Carlos	Universidade de Coimbra	Portugal	05-Oct-2009 / 30-Nov-2009
Reis de Abreu, Artur Carlos	Universidade de Coimbra	Portugal	01-Jun-2008 / 31-gen-2009
Rodrigues Pereira, Ana Isabel	Universidade do Porto	Portugal	02-Mar-2008 / 31-Mai-2009
Roscini, Claudio	Universitat de Bristol	Regne Unit	04-Mai-2009 7 03-Mai-2011
Shen, Dongghei	Shanghai Institute of Organic Chemistry	Xina	15-Des-2008 / 14-Des-2010

da Silva, Eric	Université de Lyon	França	03-Mar-2008 / 01-Mar-2010
Silva, Luisa	Universidad de Aveiro	Portugal	21-Set-2009 / 21-Gen-2010
Suarez Álvarez, Fco. José	Universidad de Oviedo	Espanya	02-Nov-2009 / 23-Des-2009
Taboada Sotomayor, M <sup>a</sup> Pilar	Universidade Estadual Paulista (UNESP)	Brasil	13-Oct-2009 / 23-Oct-2009
Yapasan, Ece	Universitat de Izmir	Turquia	21-Feb-2009 / 14-Mar-2009

## 2.3. PERSONAL D'ADMINISTRACIÓ I SERVEIS

### 2.3.1. PERSONAL D'ADMINISTRACIÓ

Carmona Larrosa, Nelida Isabel	AA	Mesas Gil, Dolores	Ad
Carretero Fernández, Victor	AA	Motta Dolcet, Purificació	Ad
Iglesias Fonseca, Eugenia	AA	Prieto Tamayo, Francisca	AA
Inchausti Cafrangra, Cecilia	GE	Rodriguez Marín, Melina	AA
Macias Blanco, Yolanda	Ad	Romero Prieto, Antonia	AA

### 2.3.2. PERSONAL TÈCNIC DE LABORATORI

Alsina Lluís, Núria	TML	Gelabert Sauló, Isidre	TEL
Catalán Romero, José Manuel	TEL	Prim Roura, Maria Teresa	TEL
Cabellos Lloria, Almudena	TEL	Quesada López, Loreto	TEL

## 3. ACTIVITAT CIENTÍFICA

### 3.1.1. GRUPS DE RECERCA

- *Grup de Tècniques de Separació en Química (GTS).* Valiente Malmagro, Manuel; Briansó Penalva, José Luis; López Mesas, Montserrat; Muñoz Tapia, Maria; Palet Ballús, Cristina; Pérez González, Gustavo; Resina Gallego, Montserrat; Alonso Sánchez, Agustín; Avila Pérez, Marta; Bernaus Darbra, Anna; Campillo Funollet, Marc; Cano Òdena, Àngels; Conesa Cabeza, Aleix; Macanás de Benito, Jorge; Pacheco Arjona, Jaime; Ramón Camí, Francesc; Soler Turu, Lluís. Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació. 2009SGR-663.
- *Grup de Catàlisi Homogènia.* Bayón Rueda, Joan Carles; Flor Pujadas, Teresa; Real Obradors, Juli; Bartés Viñas, Meritxel; Martínez Cuevas, Francisco Javier; Njje Jiménez, Abdoulie; Peral Crespo, Daniel; Tello López, Ignacio; Vallcorba Valls, Oriol.
- *Grup de Dinàmica i Mecanismes de les Reaccions Químiques i Bioquímiques.* Lluch López, Josep Maria; Garcia Viloca, Mireia; Gelabert Peiri, Ricard; González Garcia, Núria; González Lafont, Àngels; Moreno Ferrer, Miquel; Puig Álvarez, Eduard; Ramírez Anguita, Juan Manuel; Vendrell Romagosa, Oriol; Ortiz Sánchez, Juan Manuel. Departament d'Universitaris, Recerca i societat de la Informació. 2009SGR-409.
- *Grup de Fotocatàlisi i Química Verda.* Peral Pérez, José; Ayllón Esteve, José Antonio; Farré Olalla, María José; Franch Vaca, Maria Isabel; Garcia Montañó, Julia; Peral Pérez, José; Batlle Espinosa, Xavier; Gutiérrez Tauste, David; Muñoz Ortiz, Iván. Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació. 2009SGR-453.
- *Grup d'Electroquímica, Fotoquímica i Reactivitat Orgànica (GEFRO).* Gallardo García, Iluminada; Balduzzi Baruzzi, Ursula; Bourdelande Fernández, Francisco; Guirado López, Gonzalo; Herance Camacho, José Raul; Hernando Campos, Jordi; Marquet Cortés, Jordi; Tejero Villagrana, Ismael; Vilà Cusco, Neus. Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació. 2009SGR-1084.

- *Grup d'Estudis en Química Orgànica i Organometàl·lica (GEQOOM).* Pleixats Rovira, Roser; Sebastián Pérez, Rosa María; Vallribera Massó, Adelina; Shafir, Alexandr; Faggi, Enrico; Shen, Dong-Mei; Niembro Puiggené, Sandra; Borja Rodríguez, Guadalupe; Mejías Ruiz, Nereida; Salabert Sabaté, Jordi; Hincapié Ruiz, César Augusto; Monge Marcet, Amàlia; Planellas Oates, Marc. Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació. 2009SGR-1441.
- *Grups d'Estudis Teòrics d'Activació de Biomolècules.* Sodupe Roure, Mariona; Bertran Rusca, Juan; Gil Mestres, Adrià; Noguera Julián, Marc; Rodríguez Santiago, Luis Aurelio; Constantino Aguilera, Erika; Rimola Gibert, Albert; Ríos Font, Raquel. Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació. 2009SGR-638.
- *Grup de Metal·lotioneïnes: Relació Estructura-Funció i Aplicacions.* Capdevila Vidal, Mercè; Sola Casadevall, Joan; Bofill Arasa, Roger; Palacios Bonilla, Oscar; Orihuela García, Rubén; Pérez Rafael, Silvia; Pérez Zuñiga, Catalina.
- *Grup de Química de Coordinació i Aplicacions.* Casabó Gispert, Jaume; Llobet Dalmases, Antoni; Escriche Martínez, Lluís; Aguiló Carreras, Joan; Francàs Forcada, Laia; Röeser, Stephan; Vaquer Melia, Lydia.
- *Grup de Quimiometria Aplicada (GQA).* Maspoch Andrés, Santiago; Coello Bonilla, Jordi; Iturriaga Martínez, Hortensia; Maspoch Andrés, Santiago; Gené Torradadella, Jordi; Bautista Mercader, Manel; Cairós Barreto, Carlos J.; Cruz Sánchez, Jordi; Cueva Mestanza, Rubén Eduardo; Franch Lage, Felicitat; Lucio Gutiérrez, Juan Ricardo; Peguero Gutiérrez, Anna; Zamora Zamora, David. Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació. 2009SGR-1470
- *Grup de Recerca d'Estudis Quimiomètrics Aplicats a Sistemes Dinàmics.* Maspoch Andrés, Santiago; Coello Bonilla, Jordi; Amigo Rubio, José Manuel; Cairós Barreto, Carlos.
- *Grup de Ressonància Magnètica Nuclear i Estructures Supramoleculares.* Virgili Moya, Albert; Cabañas Egaña, Miquel; Estivill Domènech, Carlota; Federico de la Rúa, Miguel de; Jaime Cardiel, Carles; Parella Coll, Teodor; Sánchez Ferrando, Francesc; Burusco Goñi, Kepa Koldo; Enrech López, Raquel; Nolis Fañanas, Pau; Palomino Schatzlein, Martina; Pérez Mirón, Javier. Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació. 2009SGR-109.
- *Grup de Sensors i Biosensors.* Alonso Chamarro, Julián; Alegret Sanromà, Salvador; Baeza Labat, Maria del Mar; Bartrolí Molins, Jordi; Calvo Boluda, Daniel; Céspedes Mulero, Francisco; Esplandiú Egido, Maria José; Fàbregas Martínez, Esteve; Farré Urgell, Maria Manuela; González Bellavista, Ana; Lermo Soria, Ana Isabel; Marín Mancebo, Sergio; Merkoçi Hyka, Arben; Muraviev, Dimitri; Olivé Monllau, Rosa Maria; Puig Font, Anna; Pumera, Martín; Valle Zafra, Manuel del; Arasa Puig, Eva; Bautista Mercader, Manuel; Bonanni, Alessandra; Cortina Puig, Maria Montserrat; Gutiérrez Capitán, Manuel; Ibáñez García, Núria; Lladó Saez, Iker; Llopis González, Xavier; Massana Aiguadé, Maria; Parra Godayol, Aleix; Pérez López, Briza; Rivera Sarrate, Laia; Sánchez Ordóñez, Samuel; Zacco, Emmanuela. Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació. 2009SGR-323.
- *Grup de Síntesi, Estructura i Reactivitat Química (SERP).* Ortuño Mingarro, Maria Rosa; Bagan Navarro, Xavier; Branchadell Gallo, Vicenç; Izquierdo Salado, Sandra; Mor Iriarte, Alex; Oliva Cuyàs, Antoni; Torres Cano, Elisabet; Acosta Silva, Carlos; Aguilera Corrochano, Jordi; Cazorla García, Ana María; Illa Soler, Ona; Rúa Nieri, Federico. Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació. 2009SGR-733.
- *Grup de Síntesi i Modelització de Sistemes amb metalls de Transició.* Lledós Falcó, Agustí; Besora Bonet, Maria; González Duarte, Pilar; Maresca, Olivier Valentin; Rodríguez Rodríguez, Cristina; Rossin, Andrea; Ujaque Pérez, Gregori; Comas Vives, Aleix; Drudis Solé, Galí; Nova Flores, Ainara; Novio Vázquez, Fernando; Serra Batiste, Montserrat. Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació. 2009SGR-68.
- *Grup de Síntesi Orgànica Estereoselectiva.* Figueredo Galimany, Marta; Alibés Arqués, Ramon; Bayón Rueda, Juan Pablo; Busqué Sánchez, Félix; Casas Arce, Eva; Garcia Bardají, Gisela; Corbella Pané, Montserrat; Cucarull González, Joan Ramon; Flores Pons, Ramon; González Gálvez, David; Marjanet Artigas, Georgina; Parés Franzí, Sònia; Pérez Díez, Laura; Rustullet Oliver, Albert; Sánchez Izquierdo, Francisco. Departament d'Universitats, Recerca i Societat de la Informació. 2009SGR-1319.
- *Grup de Tiolats Metàl·lics i Metal·lotioneïnes.* González Duarte, Pilar; Serra Batiste, Montserrat; Rodríguez Rodríguez, Cristina.

- Grup de Química de Coordinació amb Lligands Funcionalitzats (LLIFGUN). Ros Badosa, Josep; Pins Picart, Josefina; Suades Ortuño, Joan; Yáñez López, Ramon.

### 3.1.2. GRUPS DE RECERCA CONSOLIDATS

- Grup de Tècniques de Separació en Química (GTS). Valiente Malmagro, Manuel. 2009SGR-663.
- Grup d'Electroquímica, Fotoquímica i Reactivitat Orgànica (GEFRO). Gallardo Garcia, Iluminada. 2009SGR-1084.
- Grup d'Estudis en Química Orgànica i Organometàl·lica (GEQOOM). Pleixats Rovira, Roser. 2009SGR-1441.
- Grup d'Estudis Teòrics d'Activació de Biomolècules. Sodupe Roure, Mariona. 2009SGR-638.
- Grup de Fotocatàlisi i Química Verda. Peral Pérez, José. 2009SGR-453.
- Grup de Quimiometria aplicada (GQA). MasPOCH Andrés, Santiago. 2009SGR-1470.
- Grup de Ressonància Magnètica Nuclear i Estructures Supramoleculares. Virgili Moya, Albert. 2009SGR-109.
- Grup de Síntesi, Estructura i Reactivitat Química (SERQ). Ortuño Mingarro, Rosa Maria. 2009SGR-733.
- Grup de Síntesi Orgànica Estereoselectiva. Figueredo Galimany, Marta. 2009SGR-1319.
- Grup de Dinàmica i Mecanismes de les Reaccions Químiques i Bioquímiques. Lluch López, Josep Maria. 2009SGR-409.
- Grup de Sensors i Biosensors. Alonso Chamarro, Julián. 2009SGR-323.
- Grup de Síntesi i Modelització de Sistemes amb Metalls de Transició. Lledós Falcó, Agustí. 2009SGR-68.

### 3.1.3. PROJECTES D'INVESTIGACIÓ

- *Activació per transferència electrònica: metodologia sintètica i mecanismes. Nous materials.* Gallardo García, Iluminada; Ministerio de Educación y Ciencia. CTQ2006-01040.
- *Anàlisi de riscos ambientals derivats de la contaminació per mercuri en el Districte miner d'Almadén i estudi d'alternatives de remediació de sòls.* Valiente Malmagro, Manuel; Ministerio de Educación y Ciencia. CTM2006-13091-C02-02.
- *Biorreconocimiento mejorado en biosensores de afinidad para biotecnología. Aplicaciones medioambientales y agroalimentarias.* Alegret Sanromà, Salvador; Ministerio de Educación y Ciencia. BIO2007-63300.
- *(Bio)Sensors basats en micro/nanoestructures. Integració en sistemes autoadaptatius d'anàlisi.* Bartolí Molins, Jordi; Ministerio de Educación y Ciencia. CTQ2006-15681-C02-01.
- *Catalitzadors recuperables de ruteni i pal·ladi per formació de materials híbrids orgànics-inorgànics. Aplicació en reaccions de metatesi i d'acoblament.* Pleixats Rovira, Roser; Ministerio de Educación y Ciencia. CTQ2006-04204.
- *Catàlisis redox y sus aplicaciones e implicaciones: un enfoque multidisciplinar.* Escríche Martínez, Luis; Ministerio de Educación y Ciencia. CTQ2007-67918-C03-02.
- *Catalysis in Water. A Computational Chemistry Challenge.* Ujaque Pérez, Gregori. Acciones Integradas Hispano-Húngara. Chemical Research Center of the Hungarian Academy of Sciences. Ministerio de Educación y Ciencia. HH2008-0028.
- *CHEM-WAVE-SURF.* Guirado López, Gonzalo. CNRS UMR – 5623-SC. Acciones Integradas Hispano-

Francesas, Ministerio de Ciencia e Innovación. HF2008-0112.

- *Composts i materials polifuncionals i/o macrocíclics amb cavitats enantiodiferenciadores. Preparació i estudi estructural, teòric i experimental.* Virgili Moya, Albert; Ministerio de Educación y Ciencia. CTQ2006-08256.
- *Compuestos restringidos conformacionalmente en el diseño de biomoléculas y nanomateriales.* Ortuño Mingarro, Maria Rosa; Ministerio de Educación y Ciencia. CTQ2007-61704.
- *Conveni per a la Creació del Laboratori Europeu Associat (LEA), Barcelona-Toulouse.* Ortuño Mingarro, Maria Rosa;
- *Desarrollo de una lengua electrónica basada en sensores potenciométricos para la detección de contaminantes en aguas.* Valle Zafra, Manuel del; Agencia Española de Cooperación Internacional para el Desarrollo. A/023678/09.
- *Desarrollo de metodologías de especiación química directa e indirecta para la caracterización eficiente de sistemas contaminados. (aguas industriales, suelos contaminados y patrimonio monumental).* Valiente Almagro, Manuel; Ministerio de Ciencia e Innovación. CTQ2009-07432.
- *Desarrollo de (bio)materiales basados en nanoestructuras. Optimización y caracterización para su aplicación en (bio)sensores y energías renovables.* Bartrolí Molins, Jordi. Ministerio de Ciencia e Innovación. CTQ2009-13873.
- *Desarrollo de entidades organometálicas para reacciones de funcionalización selectiva de moléculas orgánicas.* Lledós Falcó, Agustí; Ministerio de Ciencia e Innovación . CSD2007-00006/1.
- *Desarrollo de nuevas metodologías espectrales para el control analítico de productos y procesos.* Valiente Almagro, Manuel. Ministerio de Ciencia e Innovación. CTQ2009-08312.
- *Desarrollo de un sistema de imagen NIR hiperespectral y aplicación de métodos quimiométricos multidimensionales.* Coello Bonilla, Jordi; Ministerio de Educación y Ciencia. CTQ2007-62528.
- *Equipo de investigación en las fronteras de la química metal-orgánica.* Vallribera Massó, Adela; Ministerio de Ciencia e Innovación. CSD2007-00006/02.
- *Evaluación de la presencia de cr (VI) en cementos: desarrollo de metodologías analíticas para su cuantificación in situ y evaluación de su movilidad en pastas de cemento hidratado.* Valiente Almagro, Manuel. Ministerio de Medio Ambiente y Medio Rural y Marino. 092/PC08/2-11.1.
- *Evaluación del potencial de nanopartículas inorgánicas funcionalizadas para la eliminación de nitrógeno, fósforo, pesticidas orgánicos y metales pesados en masas de agua.* Font Cierco, Josep. Ministerio de Medio Ambiente y Medio Rural y Marino. 007/RN08/03.1.
- *Estructura, funció i interacció de proteïnes i xarxes de resposta a metalls: metalotioneïnes i metalomica. Aplicacions biotecnològiques. SP2.* Capdevila Vidal, Maria Mercè; Ministerio de Educación y Ciencia. BIO2006-14420-C02-02.
- *Estudio de la Movilidad de Metales Pesados en Suelos Contaminados.* Valiente Almagro, Manuel; Briansó Penalva, José Luis; López Mesas, Montserrat; Pérez González, Gustavo. Agencia Española de Cooperación Internacional para el Desarrollo. A/011433/07.
- *Imagen HiperEspectral y Especiación química. Valoración de técnicas Analíticas para la caracterización y clasificación de alimentos.* Valiente Almagro, Manuel. Ministerio de Ciencia e Innovación. IT2009-0024.
- *Integración del micro(bio)sensores químicos en el desarrollo de lenguas electrónicas.* Valle Zafra, Manuel del; Ministerio de Educación y Ciencia. TEC2007-68012-C03-02.
- *Interpretación molecular de los mecanismos de la catálisis homogénea: catálisis asimétrica y catalizadores bioinspirados.* Lledós Falcó, Agustí; Ministerio de Ciencia e Innovación. CTQ2008-06866-C02-01/BQU.

- *La transferencia electrónica como etapa clave en el estudio de mecanismos de reacción y síntesis de productos. Su aplicación a nuevos dispositivos y materiales moleculares.* Gallardo García, Iluminada. Ministerio de Ciencia e Innovación. CTQ2009-07469
- *L'espectroscòpia NR: una eina per a la Tecnologia Analítica de Processos (PAT).* Blanco Romia, Marcel; Ministerio de Educación y Ciencia. CTQ2006-12923.
- *Microsistemes Analítics Integrats (microTAS) amb tecnologia LTCC i de silici.* Alonso Chamarro, Julián. Ministerio de Educación y Ciencia. TEC2006-13907-C04-04.
- *Metalòmica bàsica (proteïnes, vies y redes de interacció metales-sistemes biològics) y aplicada.* SP2. Capdevila Vidal, Mercè, Ministerio de Ciencia e Innovación. BIO2009-12513-CO2-02
- *Metodologies de tintura con colorants perfluorats hidrofòbics en la industria textil y otros sectores.* Vallribera Massó, Adelina. Conveni TRACE amb Centro Tecnológico Leitat.
- *Nanopartículas metálicas y materiales híbridos orgánico-inorgánicos. Aplicaciones en catálisis.* Pleixats Rovira, Roser. Ministerio de Ciencia e Innovación. CTQ2009-07881
- *Nanotecnologías en biomedicina.* Alonso Chamarro, Julián. Ministerio de Educación y Ciencia. CSD2006-12/02.
- *Nous materials híbrids nanocompostos polímer-metall amb nanopartícules de baix cost amb estructura core-shell de metalls del grup del platí per al seu ús en aplicacions electrocatalítiques.* Muraviev, Dimitri; Ministerio de Educación y Ciencia. MAT2006-03745.
- *Network in solid waste and water treatment between Europe and Mediterranean countries.* Valiente Almagro, Manuel. Projecte Europeu 245843.
- *Nuevas plataformas de microfluidica para la miniaturización de sistemas (bio)analíticos integrados e intensificación de procesos de producción de nanomateriales.* Alonso Chamarro, Julián. Ministerio de Ciencia e Innovación. CTQ2009-12128.
- *Nuevo material nanocomposite para el tratamiento combinado de aguas.* Muraviev, Dimitri. Centre d'Innovació Empresarial. Generalitat de Catalunya. VALTEC09-2-0056.
- *Preparación de poliésteres polioles y los poliuretanos termoplásticos derivados de los mismos. Caracterización y estudio de estos materiales.* Bayón Rueda, Joan Carles. Conveni amb Merquinsa Mercados Químicos, S.L. UAB9575
- *Preparació d'intermedis per a la industria farmacèutica.* Ortuño Mingarro, Maria Rosa. Conveni amb Laboratoris Dr. Esteve, S.A.
- *RecreSearchers. Recreational Reserchers.* Sodupe Roure, Mariona. Comissió Europea. FP-PEOPLE-NIGHT-08-228736.
- *Síntesis estereoselectiva de productos naturales y análogos farmacológicamente activos.* Figueredo Galimany, Marta; Ministerio de Educación y Ciencia. CTQ2007-60613.
- *Síntesis y funcionalización de nanopartículas inorgánicas con moléculas bifuncionales. Un reto para la radioarmacia.* Ros Badosa, Josep; Ministerio de Educación y Ciencia. CTQ2007-63913.
- *Water risk management in Europe (WARMER).* Merkoçi Hyka, Arben. Comissió Europea. STREP FP6-034472-2006-IST
- *Valorització dels processos d'alliberació controlada d'ions mitjançant resines D.* Valiente Almagro, Manuel. Centre d'Innovació Empresarial. Generalitat de Catalunya. VALTEC09-1-0005.
- *Valorització de un sistema d'obtenció de hidrògeno del agua: proceso AIHidroX.* Muñoz Tapia, Maria. Centre d'Innovació Empresarial. Generalitat de Catalunya. VALTEC09-2-0003.

## 3.2. RESUM DE FINANCIACIÓ DE LA RECERCA

<u>Descripció</u>	<u>Total</u>
Altres Ajuts	323.666,00 €
Beques	289.559,27 €
Convenis	353.745,42 €
Facturació per prestació de serveis	65.595,19 €
Incorporació de personal	282.136,00 €
Infraestructura	67.614,79 €
Mobilitat	28.488,50 €
Projectes	1.346.790,95 €
Projectes Europeus	267.400,00 €
<b>Total general</b>	<b>3.024.996,12 €</b>

## 3.3. PUBLICACIONS

### 3.3.1. LLIBRES

### 3.3.2. CAPÍTOLS DE LLIBRE

### 3.3.3. ARTICLES

- Acosta-Silva, C.; Branchadell, V., “Density functional methods in the study of oxygen transfer reactions”, *Theor. Chem. Acc.*, 2009, 123, 59–66.
- Acosta-Silva, C.; Gonzalez-Blanco, O.; Branchadell, V., “Hetero-Diels-Alder reactions involving Fe(CO)<sub>3</sub>-coordinated dienal and formyltrimethylenmethane catalyzed by Lewis acids. A theoretical study”, *Can. J. Chem.*, 2009, 87, 1074-1080.
- Algarra, A. G.; Fernández-Trujillo, M. J.; Lledós, A.; Basallote, M. G., “Dihydrogen Complexes: Striking Effect of Ion Pairing to BF<sub>4</sub><sup>-</sup> on the Rotation of Coordinated Dihydrogen and the 19F Relaxation Time”, *Chem. Commun.*, 2009, 4563-4565.
- Alibés, R.; Figueredo, M., “Strategies on the Synthesis of Stemonal Alkaloids”, *Eur. J. Org. Chem.* 2009, 2421-2435.
- Al-Kaysi, R. O.; Ghaddar, T.H.; Guirado, G., “Fabrication of one-dimensional organic nanostructures using anodic aluminum oxide templates”, *Journal of Nanomaterials*, 2009, 1-14, doi:10.1155/2009/436375.

- Alonso, E.; Forniés, J.; Fortuño, C.; Lledós, A.; Martín, A.; Nova, A., "Behavior of P–Pt and P–Pd Bonds in Phosphido Complexes towards Electrophilic Fragments", *Inorg. Chem.* 2009, 48, 7679-7690.
- Alonso, I.; Trillo, B.; López, F.; Montserrat, S.; Ujaque, G.; Castedo, L.; Lledós, A.; Mascareñas, J.L., "Gold-Catalyzed [4C + 2C] Cycloadditions of Allenedienes, including an Enantioselective Version with New Phosphoramidite-based Catalysts. Mechanistic Aspects of the Divergence between [4C+3C] and [4C+2C] Pathways", *J. Am. Chem. Soc.*, 2009, 131, 13020-13030.
- Alvarez-Griera, L.; Gallardo, I.; Guirado, G., "Estimation of nitrobenzyl radicals reduction potential using spectro-electrochemical techniques", *Electrochimica Acta*, 2009, 54(22), 5098-5108.
- Amarante, G. W. ; Benassi, M. ; Milagre, H. M. S. ; Braga, A. A. C. ; Maseras, F. ; Eberlin, M. N. ; Coelho, F., "Brønsted Acid-Catalyzed Morita-Baylis-Hillman Reaction: A New Mechanistic View for Thioureas Revealed by ESI-MS(MS) Monitoring and DFT Calculations" , *Chem. Eur. J.*, 2009, 15, 12460-12469.
- Anglada, J.M. ; Bofill, J.M. ; Lluch, J.M., "The 65th birthday of Professor Santiago Olivella Nello", *Theoretical Chemistry Accounts*, 2009, 123, 1 – 2
- Aragay, G.; Pons, J.; García-Antón, J.; Mendoza, A.; Mendoza-Díaz, G.; Calvet, T.; Font-Bardía, M. ;Ros, J., "Synthesis and Characterization of New Palladium(II) Complexes Containing N-Alkylamino-3,5-diphenylpyrazole Ligands. Crystal Structure of [PdCl(L2)](BF4) {L2 = Bis[2-(3,5-diphenyl-1-pyrazolyl)ethyl]ethylamine}" , *Aust. J. Chem.*, 2009, 62, 475-482.
- Arbuse, A.; Font, M.; Martínez, M. A.; Fontrodona, X.; Prieto, M. J.; Moreno, V.; Sala, X.; Llobet, A., "DNA-Cleavage induced by macrocyclic Schiff-base dinuclear Cu(I) complexes containing pendant arms", *Inorg. Chem.*, 2009, 48(23), 11098-11107.
- Asensio, X. ; González-Lafont, À. ; Marquet, J. ; Lluch, J.M. ; Geoffroy, M., "The effect of electron-withdrawing groups in the fragmentation of the radical anions of benzyl phenyl ethers", *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM*, 2009, 913, 228 – 235.
- Avenier, P., Solans-Monfort, X.; Veyre, L.; Renili, F.; Basset, J.M. ; Eisenstein, O.; Taoufik, M.; Quadrelli, E.A., "H/D Exchange on Silica-Grafted Tantalum(V) Imido Amido [(a parts per thousand SiO)(2)Ta-(V)(NH)(NH2)] Synthesized from Either Ammonia or Dinitrogen: IR and DFT Evidence for Heterolytic Splitting of D-2". *Topics in Catalysis*, 2009, 52 (11), 1482-1491.
- Ayllón, J.A.; Lira-Cantú, M. "Application of MEH-PPV/SnO2 bilayer as hybrid solar cell" *Applied Physics A-Materials Science and Processing*. 2009 (95) 249-255.
- Baeza, M.; Montesinos, J.L.; Alonso, J.; Bartroli, J., "Simple modeling of the physical sample dispersion process in rectangular meso (micro) channels with pressure-driven flows", *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2009, 393, 1233–1243.
- Baya, M.; Dub, Pavel A.; Houghton, J.; Daran, J.C.; Belkova, N. V.; Shubina, E. S.; Epstein, L.M.; Lledós, A.; Poli, R., "Investigation of the [Cp\*Mo(PMe3)3H]n+ (n = 0, 1) Redox Pair: Dynamic Processes on Very Different Time Scales", *Inorg. Chem.* 2009 , 48, 209-220.
- Belville, C. ; Marechal, J.D.; Penetier, S.; Carmillo, P.; Masgrau, L. ; Messika-Zeitoun, L. ; Galey, J. ; Machado, G. ; Treton, D. ; Gonzales, J. ; Picard, J.Y. ; Josso, N. ; Cate, R.L. ; di Clemente, N., "Natural mutations of the anti-Mullerian hormone type II receptor found in persistent Mullerian duct syndrome affect ligand binding, signal transduction and cellular transport", *Human Molecular Genetics*, 2009, 18, 3002 – 3013.
- Bernini, R. ; Cacchi, S. ; Fabricio, G. ; Forte, G. ; Petrucci, F. ; Prastaro, A. ; Niembro, S. ; Shafir, A.; Vallribera, A., "Alkynylation of aryl halides in water with perfluoro-tagged palladium nanoparticles immobilized on silica gel under aerobic, copper-, and phosphine-free conditions in water", *Organic & Biomolecular Chemistry*, 2009, 7, 2270-2273.
- Bernini, R.; Cacchi, S.; Fabrizi, G.; Niembro, S.; Prastaro, A.; Shafir, A.; Vallribera, A.; "Perfluoro tagged gold nanoparticles immobilized on fluorinated silica-gel. A reusable catalyst for the benzylic oxidation and oxidative esterification of alcohols", *ChemSusChem*, 2009, 2, 1036-1040.

- Berthoud, R.; Rendon, N.; Blanc, F.; Solans-Monfort, X.; Coperet, C.; Eisenstein, O., "Metal fragment isomerisation upon grafting a d(2) ML4 perhydrocarbyl Os complex on a silica surface: origin and consequence", *Dalton Transactions*, 2009, (30), 5879-5886.
- Besora, M.; Lledós, A.; Maseras, F., "Protonation of Transition Metal Hydrides: A Not So Simple Process", *Chem. Soc. Rev.*, 2009, 38, 957-966.
- Blanco, M.; Zamora, D.; Planeéis, J.; Mulero, R. "Analytical control of adjuvants in herbicide formulations by NIR spectroscopy", *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, 2009, 395, 839 – 844.
- Blanco, M.; Zamora, D.; Mir, M.; Mulero, R. "Study of the lipase-catalysed esterification of stearic acid by glycerol using in-line Near Infrared Spectroscopy", *Industrial & Engineering Chemical Research*, 2009, 48, 6967- 70.
- Bofill, R.; Capdevila, M.; Atrian, S., "Independent metal-binding features of recombinant metallothioneins convergently draw a step gradation between Zn- and Cu-thioneins", *Metallomics*, 2009, 1, 229-234.
- Bofill, R.; Orihuela, R.; Romagosa, M.; Domènech, J.; Atrian, S.; Capdevila, M.; "C. elegans metallothionein isoform specificity: metal binding abilities and histidine role in CeMT1 and CeMT2", *FEBS J.*, 2009, 276, 7040-7056.
- Bonanni, A.; Esplandiú, M.J.; Del Valle, M., "Impedimetric genosensors employing COOH-modified carbon nanotube screen printed electrodes", *Biosensors and Bioelectronics*, 2009, 24, 2885–2891.
- Bonanni, A.; Pividori, M.I.; Campoy, S.; Barbé, J.; Del Valle, M., "Impedimetric detection of double-tagged PCR products using novel amplification procedures based on gold nanoparticles and Protein G", *Analyst*, 2009, 134 (3), 602-608.
- Boulho, C.; Keys, T.; Coppel, Y.; Vendier, L.; Etienne, M.; Locati, A.; Bessac, F.; Maseras F.; Pantazis, D. A.; McGrady, J. E., "C-C Coupling Constants, 1 JCC, are Reliable Probes for -C-C Agostic Structures", *Organometallics*, 2009, 28, 940-943.
- Bozoglian, F.; Romain, S.; Ertem, M. Z.; Todorova, T. K.; Sens, C.; Mola, J.; Rodríguez, M.; Romero I.; Benet-Buchholz, J.; Fontrodona, X.; Cramer, C. J.; Gagliardi, L.; Llobet, A., "The Ru-Hbpp Water Oxidation Catalyst", *J. Am. Chem. Soc.*, 2009, 131(42), 15176-15187.
- Brasil de Oliveira Marques, P.R.; Lermo, A.; Campoy, S.; Yamanaka, H.; Barbé, J.; Alegret, S.; Pividori, M.I., "Double-Tagging Polymerase Chain Reaction with a Thiolated Primer and Electrochemical Genosensing based on Gold Nanocomposite Sensor for Food Safety". *Analytical Chemistry*, 2009, 81 (4), 1332–1339.
- Brenner, I.; Pacheco, J.; Valiente, M., "Comparison of interface cones for analysis of sodium-rich samples using quadrupole ICP-MS", *Journal of analytical atomic spectrometry*, 2009, 24 (11), 1558-1563.
- Bruszynska, M.; Sikorska, E.; Komasa, A.; Khmelinskii, I.; Ferreira, L.F.V.; Hernando, J.; Karolczak, J.; Kubicki, M.; Bourdelande, J.L.; Sikorski, M., "Electronic structure and spectral properties of selected trimethyl-alloxazines: Combined experimental and DFT study", *Chemical Physics*, 2009, 361, 83-93
- Cairós, C.; Amigo, J.M.; Watt, R.; Coello, J. i MasPOCH, S., "Implementation of enhanced correlation maps in near infrared chemical images: Application in pharmaceutical research." *Talanta*, 2009, 79, 657-664.
- Cantero, R.; Riba, J.R.; Canals, T.; Izquierdo L.L.; Iturriaga, H. "Characterization of leather finishing by IR spectroscopy and canonical variate analysis". *Journal of the Society of Leather technology and Chemist*, 2009, 93, 12-17.
- Carnicer, M.; Baumann, K.; Töplitz, I.; Sánchez-Ferrando, F.; Mattanovich, D.; Ferrer, P. and Albiol, J. "Macromolecular and Elemental Composition Analysis and Extracellular Metabolite Balances of *Pichia pastoris* Growing at Different Oxygen Levels". *Microbial Cell Factories*, 2009, 8, 65-78.
- Carrer, A.; Suades, J.; Parera, E.; Zangoni, E.; Alvarez-Larena, A.; Giron, M.; Mazzi, U., "A novel approach for the synthesis of rhenium and technetium-99m tricarbonyl complexes with a (SS)(P) coordinative set", *J. Label. Comp. Radiopharm*, 2009, 52, S466.

- Carrilho, R. M. B.; Abreu, A. R.; Petocz, G.; Bayon, J. C.; Moreno, Maria Jose S. M.; Kollar, L.; Pereira, M. M. "New binaphthyl-based C3-symmetric chiral hemilabile monophosphite ligands: synthesis and characterization of their platinum complexes". *Chemistry Letters*, 2009, 38(8), 844-845.
- Carrillo F.; Defays, B.; Colom, X.; Suñol, J. J.; López-Mesas, M., "Thermal degradation of lyocell/poly-N-isopropylacrylamide graft copolymers gels", *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 2009, 97(3), 945-948.
- Christian, G. J.; Arbuse, A.; Fontrodona, X.; Martínez, M. A.; Llobet, A.; Maseras, F., "Oxidative dehydrogenation of an amine group of a macrocyclic ligand in the coordination sphere of a CuII complex", *Dalton Trans.*, 2009, 6013-6020.
- Comas-Vives, A.; Ujaque, G.; Lledós, A., "Mechanistic Evaluation of Metal-Catalyzed Hydrogen-Transfer Processes: The Shvo Catalyst as an Example of Computational Unravelling", *J. Mol. Struct. Theochem* (Special Issue: Recent advances in the theoretical understanding of catalysis) 2009, 903, 123-132 (invited contribution).
- Constantino, E.; Rimola, A.; Sodupe, M.; Rodríguez-Santiago, L., "Coordination of (Glycyl)(n)glycine (n=1-3) to Co<sup>+</sup> and Co<sup>2+</sup>", *Journal of Physical Chemistry A*, 2009, 113(31), 8883-8892.
- Cruz, J.; Bautista, M.; Amigo, J. M.; Blanco, M. "NIR-Chemica Imaging study of acetylsalicylic acid commercial tablets". *Talanta*, 2009, 80, 473-478.
- Cuenca, A. B.; Montserrat, S.; Hossain, K. M.; Mancha, G.; Lledós, A.; Medio-Simón, M.; Ujaque, G.; Asensio, G., "Gold(I)-Catalyzed Intermolecular Oxyarylation of Alkynes: Unexpected Regiochemistry in the Alkylation of Arenes", *Org. Lett.*, 2009, 11, 4906-4909.
- De León, A.; Pons, J.; García-Antón, J.; Solans, X.; Font-Bardía, M.; Ros, J., "Reactivity of [PdCl(μ-med)]<sub>2</sub> with monodentate anionic ligands. Structure of dinuclear complexes [PdCl(μ-med)]<sub>2</sub> (X = SCN<sup>-</sup>, N<sub>3</sub><sup>-</sup>). [Hmed = N-(2-mercaptoethyl)-3,5-dimethylpyrazole]", *Inorg. Chim. Acta*, 2009, 362, 1528-1534.
- De León, A.; Pons, J.; García-Antón, J.; Solans, X.; Font-Bardía, M.; Ros, J., "Preparation and characterization of mononuclear Pd(II) complexes with 1,8-bis(3,5-dimethyl-1-pyrazolyl)-3,6-dithiooctane (bddo) ligand: Spectroscopy studies and crystal structure of trans-[Pd(SCN)<sub>2</sub>(bddo)]", *Polyhedron*, 2009, 28, 2165-2170.
- De León, A.; Pons, J.; García-Antón, J.; Solans, X.; Font-Bardía, M.; Ros, J., "Reactivity of [PdCl(bdtp)](BF<sub>4</sub>) with monodentate neutral and anionic ligands. Structure of [Pd(bdtp)(PPh<sub>3</sub>)](BF<sub>4</sub>)<sub>2</sub> (bdtp = 1,5-bis(3,5-dimethyl-1-pyrazolyl)-3-thiapentane)", *Inorg. Chim. Acta*, 2009, 362, 3801-3806.
- Domènech, X.; Muñoz, I.; Peral, J., "Predicted Environmental Concentrations of Cocaine and Benzoylcegonine in a Model Environmental System", *Water Research*, 2009, 43, 5236-5242.
- Donald, S. M. A.; Vidal-Ferran, A.; Maseras, F., "A DFT/MM analysis of the effect of ligand substituents on asymmetric hydrogenation catalyzed by rhodium complexes with phosphine-phosphinite ligands", *Can. J. Chem.*, 2009, 87, 1273-1279.
- El-Barghouthi, M.I.; Jaime, C.; Akielah, R. E.; Al-Sakhen, N. A.; Masoud, N. A.; Issa, A. A.; Badwan, A. A.; Zughul, M. B., "Free Energy Perturbation and MM/PBSA Studies on Inclusion Complexes of Some Structurally Related Compounds with beta-Cyclodextrin", *Supramolecular Chemistry*, 2009, 21(7), 603-610.
- Espinal, M.; Pons, J.; García-Antón, J.; Solans, X.; Font-Bardía, M.; Ros, J., "Unexpected formation of [Pd(bedp)][Pd<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub>(μ-SMe)<sub>2</sub>] (bedp = 1,4-bis[2-(3,5-dimethyl-1-pyrazolyl)ethyl]piperazine). Structural characterisation and spectroscopic properties", *Inorg. Chem. Commun.*, 2009, 12, 368-370.
- Esplandiú, M.J.; Pacios, M.; Cyganek, L.; Bartroli, J.; Del Valle, M., "Enhancing the electrochemical response of Myoglobin with carbon nanotube electrodes", *Nanotechnology*, 2009, 20, 355502.
- Estivill, C.; Mendizabal, J.; Virgili, A.;\*Monteagudo, E.; Flor, T.; Sánchez-Ferrando, F.; Alvarez-Larena, A.; Piniella, J.F., "Preparation of (1R,1'R)-1,1'-(anthracene-9,10-diyl) bis (2,2,2-trifluoroethanamine): achiral diamine with low basicity", *Tetrahedron*, 2009, 6, 171-176.
- Estruga, M.; Domingo, C.; Domènech, X.; Ayllón, J.A., "Low temperature N,N-dimethylformamide-assisted synthesis and characterization of anatase-rutile biphasic nanostructured titania", *Nanotechnology*, 2009, 20, 125604-125612.

- Etienne, M. ; McGrady, J. E. ; Maseras, F., "Agostic interactions in alkyl derivatives of sterically hindered tris(pyrazolyl)borate complexes of niobium", *Coord. Chem. Rev.*, 2009, 253, 635-646.
- Fernández, D. ; Torres, E. ; Avilés, F. X. ; Ortuño, R. M. ; Vendrell, J., "Cyclobutane-containing peptides: Evaluation as novel metallocoarboxypeptidase inhibitors and modelling of their mode of action", *Biorg. Med. Chem.* 2009, 17, 3824-3828.
- Fernández, R. ; Grrirane, A. ; Resa, I. ; Rodríguez, A. ; Carmona E.; Alvarez, E. ; Gutiérrez-Puebla, E. ; Monge, A. ; López del Amo, J. M. ; Limbach, H.-H. ; Lledós, A. ; Maseras, F. ; Del Río, D., "Structural Analysis of Zincoenes with Substituted Cyclopentadienyl Rings", *Chem. Eur. J.*, 2009, 15, 924-935.
- Ferrer, E.; Alibés, R.; Busqué, F.; Figueredo, M.; Font, J.; De March, P. "Enantiodivergent Synthesis of Cyclohexenyl Nucleosides" *J. Org. Chem.* 2009, 74, 2425-2432.
- Filippov, O. A.; Tsupreva, V. N.; Golubinskaya, L. M.; Krylova, A. I.; Bregadze, V. I.; Lledós, A.; Epstein, L. M.; Shubina, E. S., "Proton-Transfer and H<sub>2</sub>-Elimination Reactions of Trimethylamine Alane: Role of Dihydrogen Bonding and Lewis Acid-base Interactions", *Inorg. Chem.* 2009, 48, 3667-3678.
- Flores, R.; Alibés, R.; Figueredo, M.; Font, J., "Highly stereoselective synthesis of novel cyclobutane-fused azanucleosides", *Tetrahedron*, 2009, 65, 6912-6917.
- Francàs, L.; Sala, X.; Benet-Buchholz, J.; Escriche, L.; Llobet, A. "Ru-Hbpp based water oxidation catalyst anchored in TiO<sub>2</sub>-rutile", *ChemSusChem.*, 2009, 2, 321-329.
- Gallardo, I.; Guirado, G.; Prats, G.; Takeshita, M., "Electrochemically triggered conversion between metacyclophan-1-ene and dihydropyrene molecular switching systems", *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2009, 11(10), 1502-1507.
- Garcia-Garcia, J. ; Miranda, E. ; Martinez-Cisneros, C.S. ; Alonso, J. ; Viladoms, L. ; De Mariscal, P., "Porosity enhancement by the utilization of screening patterns in electro-perforated paper webs", *Journal of Electrostatics*, doi:10.1016/j.elstat, 2009.11.010 Available online 10 December 2009.
- Garcia-Gonzalez, C.A., Saurina, J.; Ayllon, J.A.; Domingo, C. "Preparation and Characterization of Surface Silanized TiO<sub>2</sub> Nanoparticles under Compressed CO<sub>2</sub>". *Journal of Physical Chemistry C* 2009 (113) 13780-13786.
- Gelabert, R. ; Moreno, M. ; Lluch, J.M., "A theoretical assesment of factors causing different molecular volumes in isotopologues", *Journal of Physical Chemistry A*, 2009, 113, 14161 – 14169.
- Gella, C.; Ferrer, E.; Alibés, R.; Busqué, F.; de March, P.; Figueredo, M.; Font, J., "A Metal-free General Procedure for Oxidation of Secondary Amines to Nitrones", *J. Org. Chem.* 2009, 74, 6365-6367.
- Gil, A., Sodupe, M.; Bertran, J., "Influence of Ionization on the Conformational Preferences of Peptide Models. Ramachandran Surfaces of N-Formyl-glycine Amide and N-Formyl-alanine Amide Radical Cations", *Journal of Computational Chemistry*, 2009, 30(12), 1771-1784.
- Gil, A.; Branchadell, V. ; Bertran, J.; Oliva, A.; "An Analysis of the Different Behavior of DNA and RNA through the Study of the Mutual Relationship between Stacking and Hydrogen Bonding", *Journal of Physical Chemistry B*, 2009. 113(14), 4907-4914.
- Gimbert, C. ; Vallribera, A., "A straightforward synthesis of benzothiazines", *Organic Letters*, 2009, 11 (2), 269-271, DOI: 10.1021/ol80234.
- González-Bellavista, A.; Atrian, S. ; Muñoz, M. ; Capdevila, M. ; Fabregas, E., "Novel potentiometric sensors based on polysulfone immobilized metallothioneins as metal-ionophores". *Talanta*, 2009, 77, 1528-1533.
- González-Gálvez, D.; García-García, E.; Alibés, R.; Bayón, P.; de March, P.; Figueredo, M.; Font, J., "Enantioselective Approach to Securinega Alkaloids. Total Synthesis of Securinine and (-)-Norsecurinine", *J. Org. Chem.* 2009, 74, 6199-6211.
- González-Lafont, À., "Lipoxigenasa y glutamato racemasa: dos dianas terapéuticas", *Lifescienceslab*, 2009, 2, 28 – 31.

- Gourlaouen, C. ; Ujaque, G. ; Lledós, A. ; Medio-Simon, M. ; Asensio, G.; Maseras, F., "Why is the Suzuki-Miyaura cross-coupling of sp<sup>3</sup> carbons in  $\alpha$ -bromosulfoxide systems fast and stereoselective? A DFT study on the mechanism", *J. Org. Chem.*, 2009, 74, 4049-4054.
- Gregory, F.; Badetti, E.; Colliere, V.; Majoral, J.P.; Sebastian, R.M.; Caminade, A.M., "Dendritic structures within dendritic structures: dendrimer-induced formation and self-assembly of nanoparticle networks", *Nanoscale*, 2009, 1, 233-237.
- Guell, M.; Luis, J.M. ; Rodriguez-Santiago, L.; Sodupe, M. ; Sola, M., "Structure, Bonding, and Relative Stability of the Ground and Low-Lying Electronic States of CuO<sub>2</sub>. The Role of Exact Exchange", *Journal of Physical Chemistry A*, 2009, 113(7), 1308-1317.
- Guerrero, M.; Pons, J.; Parella, T.; Font-Bardía, M.; Calvet, T.; Ros, J., "Variable coordination behavior of New Hybrid Pyrazole Ligand: Synthesis and Characterization of several ZnII, CdII, HgII, PdII, PtII and NiII Complexes", *Inorg. Chem.*, 2009, 48(18), 8736-8750.
- Gutiérrez, J.M. ; Moreno-Barón, L. ; Del Valle, M.; Leija, L. ; Muñoz, R. , "Wavelet Neural Network as a multivariate calibration method in voltammetric electronic tongues", *Neural Networks World Journal* 1/09, 2009, 53-64.
- Gutiérrez, J.M.; Moreno-Barón, L.; Céspedes, F.; Muñoz, R.; Del Valle, M., "Resolution of heavy metal mixtures from highly overlapped ASV Voltammograms employing a wavelet neural network", *Electroanalysis*, 2009, 21, 445-451.
- Gutiérrez, M. C.; López-Mesas, M.; Lacorte, M. T.; Cegarra, J. "Infrared analysis of the amino group content in functional aminopolydimethylsiloxanes". *Fibers and Polymers*, 2009, 10 (4), 437-441.
- Illa, O. ; Celis, S. ; El-Kazzi, A. ; Baceiredo, A. ; Branchadell, V. ; Ortuño, R. M., "Stereoselective synthetic entry to beta-substituted alpha-[(trans)-vinyl] phosphonamides", *Tetrahedron*, 2009, 65, 2451-2454.
- Imaz, I. ; Hernando, J. ; Ruiz-Molina, D. ; MasPOCH, D., "Metal-Organic Spheres as Functional Systems for Guest Encapsulation", *Angewandte Chemie International Edition*, 2009, 48, 2325-2329.
- Lara, P.; Paneque, M.; Poveda, M. L.; Santos, L.L.; Valpuesta, J. E. ; Salazar, V.; Carmona, E.; Moncho, S.; Ujaque, G.; Lledós, A.; Álvarez, E.; Maya, C.; Mereiter, K., . "Synthetic, Mechanistic and Theoretical Studies on the Generation of Iridium Hydride Alkylidene and Iridium Hydride Alkene Isomers", *Chem. Eur. J.*, 2009, 15, 9046-9057.
- Lara, P.; Paneque, M.; Poveda, M. L.; Santos, L.L.; Valpuesta, J. E. V.; Carmona, E.; Moncho, S.; Ujaque, G.; Lledós, A.; Álvarez, E.; Mereiter, K., "Experimental and Computational Studies on the Iridium Activation of Aliphatic and Aromatic C-H Bonds of Alkyl Aryl Ethers and Related Molecules", *Chem. Eur. J.* 2009, 15, 9034-9045.
- Lemos, S. G.; Menezes, E. A. ; Chaves, F. S. ; Nogueira, A. R. A. ; Torre-Neto, A. ; Parra, A. ; Alonso, J., "In Situ Soil Phosphorus Monitoring Probe Compared with Conventional Extraction Procedures", *Communications in Soil Science and Plant Analysis*, 2009, 40, 1282-1294.
- Lermo, A.; Fabiano, S.; Hernández, S.; Galve, R. ; Marco, M.P.; Alegret, S.; Pividori, M.I. "Rapid electrochemical magneto immunosensing of folic acid in vitamin-fortified food products", *Biosensors and Bioelectronics*, 2009, 24, 2057-2063.
- Liébana, S.; Lermo, A.; Campoy, S.; Barbé, J.; Alegret, S.; Pividori, M.I., "Magneto Immunoseparation of Pathogenic Bacteria and Electrochemical Magneto Genosensing of the Double-Tagged Amplicon", *Analytical Chemistry*, 2009, 81, 5812-5820.
- Liébana, S.; Lermo, A.; Campoy, S.; Cortés, M.P.; Alegret, S.; Pividori, M.I., "Rapid detection of Salmonella in milk by electrochemical magneto immunosensing", *Biosensors and Bioelectronics*, 2009, 25, 510-513.
- Llopis, X. ; Pumera, M. ; Alegret S.; Merkoçi, A., "Lab-on-a-chip for ultrasensitive detection of carbofuran by enzymatic inhibition with replacement of enzyme using magnetic beads", *Lab on a Chip*, 2009, 9, 213-218.

- López-Canut, V.; Martí, S.; Bertran, J.; Moliner, V. and Tuñón, I. “Theoretical modeling of the reaction mechanism of phosphate monoesterhydrolysis in alkaline phosphatase.” *J. Phys. Chem. B*, 2009, 113, 7816-7824.
- Mac, D. H. ; Roisnel, T. ; Branchadell, V. ; Grée, R., “Synthesis of New Bicycloalkane Derivatives from Allylic Alcohols/Lactols by a Tandem Isomerization-Intramolecular Aldolization Process”, *Synlett*, 2009, 1969-1973.
- Martí, S.; Andrés, J.; Moliner, V.; Silla, E.; Tuñón, I. and Bertran, J. “Mechanism and plasticity of isochorismate pyruvate lyase: a computational study.” *J. Am. Chem. Soc.*, 2009, 1312, 16156-16161.
- Martínez-Cisneros, C.S.; Da Rocha, Z.; Ferreira, M.; Valdes, F.; Seabra, A.; Gongora-Rubio, M.; Alonso-Chamarro, J., “A Monolithic Continuous-Flow Microanalyzer with Amperometric Detection Based on the Green Tape Technology”, *Analytical Chemistry*, 2009, 81 (17), 7448–7453.
- Martínez-Lozano, S.; Julià Maset, E.; Rigola Lapeña, M.; Puy Marimón N.; Bartrolí Almera, J.; Bartroli Molins, J., “El ricino, una especie vegetal de interés industrial”, *Ingeniería Química*, 2009, 466, 188-192.
- Mejías, N.; Serra-Muns, A.; Pleixats, R.; Shafir, A.; Tristany, M., “Water-soluble metal nanoparticles with PEG-tagged 15-membered azamacrocycles as stabilizers”, *Dalton Trans*, 2009, 7748-7755.
- Mignon, P.; Ugliengo, P.; Sodupe, M., "Theoretical Study of the Adsorption of RNA/DNA Bases on the External Surfaces of Na<sup>+</sup>-Montmorillonite", *Journal of Physical Chemistry C*, 2009, 113(31), 13741-13749.
- Mola, J.; Pujol, D.; Rodríguez, M.; Romero, I.; Sala, X.; Katz, N.; Parella, T.; Benet-Buchholz, J.; Fontrodona, X; Llobet, A., “Synthesis and Structure of Novel RuII-N□C-Me Complexes and their Activity Towards Nitrile Hydrolysis: An Examination of Ligand Effects”, *Aust. J. Chem.* 2009, 62, 1675-1683.
- Moncho, S. ; Ujaque, G. ; Espinet, P. ; Maseras, F. ; Lledós, A., "The Role of Amide Ligands in the Stabilization of Pd(II) Tricoordinated Complexes. Is the Pd-NR<sub>2</sub> Bond Order Single or Higher?", *Theor. Chem. Acc.*, 2009, 123, 75-84.
- Monroy-Barreto, M.; Aguilar, J.C.; Rodríguez de San Miguel, E.; Ocampo, A. L.; Muñoz, M.; de Gyves, J., “Novel semi-interpenetrating polymer network hybrid membranes for proton conduction”, *Journal of Membrane Science* , 2009, 344, Issues 1-2, 92-100.
- Montenegro, M.; Garcia-Viloca, M. ; González-Lafont, À. ; Lluch, J.M., “Benchmark calculations on models of the phosphoryl transfer reaction catalyzed by protein kinase A.”, *Theoretical Chemistry Accounts*, 2009, 124, 197 – 215.
- Morrison, E.; Gutiérrez-Tauste, D.; Domingo, C.; Vigil, E.; Ayllón, J. A. “One step room temperature photodeposition of Cu/TiO<sub>2</sub> composite films and its conversion to CuO/TiO<sub>2</sub>.” *Thin Solid Films*. 2009 (517) 5621-5624.
- Muñoz, J.A.; López-Mesas, M.; Valiente, M., “Development and validation of a simple determination of urine metabolites (oxalate, citrate, uric acid and creatinine) by capillary zone electrophoresis”, *Talanta*, Article in Press, Corrected Proof.
- Muñoz, S.; Pons, J.; García-Antón, J.; Font-Bardía, M.; Ros, J., “Cleavage of NpzCH<sub>2</sub>-OP and unexpected formation of bis(3,5-dimethyl-1H-pyrazol-1-yl)methane (dmbpm): X-ray crystal structure of [PdCl<sub>2</sub>(dmbpm)]”, *J. Coord. Chem.*, 2009, 62(24), 3940-3950.
- Muñoz, J. A.; López-Mesas, M.; Valiente, M., “Minimum handling method for the analysis of phosphorous inhibitors of urolithiasis (pyrophosphate and phytic acid) in urine by SPE-ICP techniques”, *Analytica Chimica Acta* , 2010, 658, Issue 2, 204-208.
- Musso, F.; Sodupe, M.; Corno, M.; Ugliengo, P., "H-Bond Features of Fully Hydroxylated Surfaces of Crystalline Silica Polymorphs: A Periodic B3LYP Study", *Journal of Physical Chemistry C*, 2009, 113(41), 17876-17884.
- Navarro, M. V.; Murillo, R.; Mastral, A. M.; Puy, N.; Bartroli, J., “Application of the Distributed Activation Energy Model to Biomass and Biomass Constituents Devolatilization”, *Aiche Journal*, 2009, 55, 2700-2715.

- Noguera, M.; Rios-Font, R. ; Rodriguez-Santiago, L. ; Solans-Monfort, X. ; Oliva, A. ; Bertran, J. ; Sodupe, M. , "Influence of pi-stacking on the N7 and O6 proton affinity of guanine", *Theoretical Chemistry Accounts*, 2009, 123(1-2), 105-111.
- Nova, A.; Mas-Ballesté, R.; Ujaque, G.; González-Duarte, P.; Lledós, A., "Aromatic C-F Activation by Complexes Containing the {Pt2S2} Core via Nucleophilic Substitution: A Combined Experimental and Theoretical Study", *Dalton Trans.*, 2009, 5980-5988.
- Olivé-Monllau, R.; Baeza, M.; Bartrolí, J.; Céspedes, F., "Novel amperometric sensor based on rigid near-percolation composite", *Electroanalysis*, 2009, 21 (8), 931-938.
- Olivé-Monllau, R.; Orozco, J.; Fernández-Sánchez, C.; Baeza, M.; Bartrolí, J.; Jimenez-Jorquera, C.; Céspedes, F., "Flow Injection Analysis system based on amperometric thin-film transducers for free chlorine detection in swimming pool waters", *Talanta*, 2009, 77, 463-467.
- Pacios, M.; Cyganek, L.; Del Valle, M. ; Esplandiú, M.J., "Amperometric biosensors based on carbon nanotubes", *Journal of Nanoscience and Nanotechnology* , 2009, 9, 6132 -6138.
- Palomino-Schätzlein, M.; Burusco, K.K. ; Parella, T. ; Virgili, A. ; Jaime, C., "Synthesis and structural characterization of a new chiral macrocycle derived from  $\alpha,\alpha'$ -(bistrifluoromethyl)-9,10-anthracendimethanol and terephthalic acid", *J. Inc. Phen. Mac. Chem.*, 2009, 65(3), 419-426.
- Pandey, K. K.; Lledós, A., "Linear M≡E-Me Versus Bent M-E-Me: Bonding Analysis in Heavier Metal Alkyne Complexes [(Cp)(CO)2M≡EMe] and Metalloalkylenes [(Cp)(CO)3M-EMe] (M = Cr, Mo, W; E = Si, Ge, Sn, Pb)", *Inorg. Chem.* 2009, 48, 2748-2759.
- Pandey, K.K.; Lledós, A.; Maseras, F., "The Nature of M-B Versus M=B Bonds in Cationic Terminal Borylene Complexes: Structure and Energy Analysis in the Borylene Complexes [( $\eta^5$ -C5H5)(CO)2M{B( $\eta^5$ -C5Me5)}]+, [( $\eta^5$ -C5H5)(CO)2M(BMes)]+, and [( $\eta^5$ -C5H5)(CO)2M(BNMe2)]+ (M = Fe, Ru, Os)", *Organometallics*, 2009, 28, 6442-6449.
- Paton, R. S.; Maseras, F., "Gold (I)-Catalyzed Intermolecular Hydroalkoxylation of Allenes: a DFT study", *Org. Lett.*, 2009, 11, 2237-2240.
- Pérez-Rodríguez, M. ; Braga, A. A. C. ; Garcia-Melchor, M. ; Pérez-Temprano, M. H. ; Casares, J. A. ; Ujaque, G. ; De Lera, A. R. ; Álvarez, R. ; Maseras, F. ; Espinet, P., "The C-C Reductive Elimination in Palladium Complexes, and the Role of Coupling Additives. A DFT Study Supported by Experiment", *J. Am. Chem. Soc.*, 2009, 131, 3650-3657.
- Pividori, M.I. ; Alegret, S., "Magneto immunosensors y genosensors para bacterias patógenas", *Alimentaria*, 2009, 409, 70-75.
- Pividori, M.I.; Lermo, A.; Bonanni, A.; Alegret,S.; Del Valle, M., "Electrochemical immunosensor for the diagnosis of celiac disease", *Analytical Biochemistry*, 2009, 388, 229-234.
- Plata, J.J.; García-Mota, M ; Braga, A. A. C. ; López, N. ; Maseras, F., "Vinyl acetate synthesis on homogeneous and heterogeneous Pd-based catalysts: a theoretical analysis on the reaction mechanisms", *J. Phys. Chem. A*, 2009, 113, 11758-11762.
- Pons, J.; García-Antón, J.; Font-Bardía, M.; Calvet, T.; Ros, J., "Coordination compounds of Cd(II) with several bidentate-NN' and tridentate-NN'N nitrogen donor ligands. 113Cd NMR studies of monomeric compounds containing nitrogen donor atoms", *Inorg. Chim. Acta*, 2009, 362, 2698-2703.
- Puig, E., Mixcoha, E.; Garcia-Viloca, M.; González-Lafont, À. ; Lluch, J.M., "How the substrate D-glutamate drives the catalytic action of Bacillus subtilis glutamate racemase", *Journal of the American Chemical Society*, 2009, 131, 3509 – 3521.
- Puy, N.; Alier, S.; Bartrolí, J., "L'ús de la biomassa i la gestió dels boscos", *Medi Ambient. Tecnologia i Cultura*, 2009, 44, 48-57.
- Ramírez-Anguita, J.M. ; González-Lafont, À. ; Lluch, J.M., "Formation pathways of CH3SOH from CH3S(OH)CH3 in the presence of O2: a theoretical study", *Theoretical Chemistry Accounts*, 2009, 123, 93 – 103.

- Ramírez-Anguila, J.M.; González-Lafont, À.; Lluch, J.M., "Formation pathways of DMSO<sub>2</sub> in the addition channel of the OH-initiated DMS oxidation: A theoretical study", *Journal of Computational Chemistry*, 2009, 30, 1477 – 1489.
- Ramírez-Anguila, J.M.; González-Lafont, À.; Lluch, J.M., "Formation pathways of DMSO from DMS-OH in the presence of O<sub>2</sub> and NO<sub>x</sub>: A theoretical study", *Journal of Computational Chemistry*, 2009, 30, 173 – 182.
- Resina, M.; Macanás, J.; Fontàs, C.; Palet, C.; Muñoz, M., "A comparative study of the selective transport of Zn/Cd and Pt/Pd couples with activated composite membranes and hybrid membranes", *Desalination*, 2009, 240, Issues 1-3, 316-325.
- Rich, J.; Rodríguez, M.; Romero, I.; Vaquer, L.; Sala, X.; Llobet, A.; Corbella, M.; Collomb, M-N.; Fontrodona, X., "Mn(II) complexes containing the polypyridylic chiral ligand (–)-pinene[5,6]-bipyridine. Catalysts for oxidation reactions", *Dalton Trans.*, 2009, 38, 8117-8126.
- Ricoux, R.; Allard, M.; Dubuc, R.; Dupont, C.; Marechal, J.D.; Mahy, J.P., "Selective oxidation of aromatic sulfide catalyzed by an artificial metalloenzyme: new activity of hemozymes", *Org. Biomol. Chem.*, 2009, 7, 3208-3211.
- Rimola, A.; Sodupe, M.; Ugliengo, P., "Affinity Scale for the Interaction of Amino Acids with Silica Surfaces", *Journal of Physical Chemistry C*, 2009, 113(14), 5741-5750.
- Rimola, A.; Ugliengo, P.; Sodupe, M., "Formation versus Hydrolysis of the Peptide Bond from a Quantum-mechanical Viewpoint: The Role of Mineral Surfaces and Implications for the Origin of Life", *International Journal of Molecular Sciences*, 2009, 10(3), 746-760.
- Rodríguez-Lucena, D.; Ortiz Mellet, C.; Jaime, C.; Burusco, K.K.; García Fernández, J.M.; Benito, J.M., "Size-Tunable Trehalose-Based Nanocavities: Synthesis, Structure, and Inclusion Properties of Large-Ring Cyclotrehalans", *J. Org. Chem.*, 2009, 74(8), 2997–3008.
- Rodríguez-Rodríguez, C.; de Groot, N.S.; Rimola, A.; Alvarez-Larena, A.; Lloveras, J. Vidal-Gancedo, V.; Ventura, S.; Vendrell, J.; Sodupe, M.; Gonzalez-Duarte, P., "Design, Selection, and Characterization of Thioflavin-Based Intercalation Compounds with Metal Chelating Properties for Application in Alzheimer's Disease", *Journal of the American Chemical Society*, 2009, 131(4), 1436-1451.
- Romain, S.; Vigara, L.; Llobet, A., "Oxygen-Oxygen Bond Formation Pathways Promoted by Ru Complexes", *Acc. Chem. Res.*, 2009, 42(12), 1944-1953.
- Romain, S.; Bozoglian, F.; Sala, X.; Antoni Llobet, A., "Oxygen-oxygen bond formation by the Ru-Hbpp water oxidation catalyst occurs solely via an intramolecular reaction pathway", *J. Am. Chem. Soc.*, 2009, 131, 2768-2769.
- Roper, J.; Beach, L.; Alcalà, M.; Rentas, R.; Dae, R.; Románach, R. "Near-infrared spectroscopy for the in-line characterization of powder voiding. Part I: Development of the methodology", *Journal Pharmaceutical Innovation*, 2009, 4, 187-197.
- Rossin, A.; Caporali, M.; Gonsalvi, L.; Guerri, A.; Lledós, A.; Peruzzini, M.; Zanobini, F., "Selective B-H vs N-H Bond Activation in Ammonia Borane by [Ir(dppm)<sub>2</sub>OTf]", *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2009, 3055-3059.
- Ruiz-Pernia, J.J.; Garcia-Viloca, M.; Bhattacharyya, S.; Truhlar, D.G.; Muñoz, I., "Critical Role of Substrate Conformational Change in the Proton Transfer Process Catalyzed by 4-Oxalocrotonate Tautomerase", *Journal of the American Chemical Society*, 2009, 131, 2687 – 2698.
- Sala, X.; Romero, I.; Rodríguez, M.; Escriche, L.; Llobet, A., "Molecular catalysts that oxidize water to dioxygen", *Angewandte Chemie, International Edition*, 2009, 48 (16), 2842-2852.
- Sala, X.; Romero, I.; Rodríguez, M.; Escriche, L.; Llobet, A., "Water oxidation catalysts based on transition metal complexes", *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2009, 48, 2842-2852.
- Sanchez, S.; Fabregas, E.; Iwai, H.; Pumera, M., "Phase-inversion method for incorporation of metal nanoparticles into carbon-nanotube/polymer composites", *Small*, 2009, 5 (7), 795-799.

- Sanchez, S.; Fabregas, E.; Pumera, M., “Electrochemical activation of carbon nanotube/polymer composites”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2009, 11 (1), 182-186.
- Sanchez, S.; Pumera, M.; Fabregas, E.; Bartroli, J.; Esplandiú, M. J., “Carbon nanotube/polysulfone soft composites: preparation, characterization and application for electrochemical sensing of biomarkers”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2009, 11, 7721-7728.
- Santos, H. M.; Pedras, B.; Tamayo, A.; Casabo, J.; Escriche, L.; Covelo, B.; Capelo, J. L.; Lodeiro, C., “New chemosensors based on thiomacrocyclic-containing coumarin-343 fluoroionophore: X-ray structures and previous results on the effect of cation binding on the photophysical properties”, *Inorganic Chemistry Communications*, 2009, 12 (11), 1128-1134.
- Serra, A.; Domènech, X.; Arias, C.; Brillas, E.; Peral, J., “Oxidation of alpha-methylphenylglycine under Fenton and electro-Fenton conditions in the dark and in the presence of solar light”, *Appl. Catal. B: Environmental*, 2009, 89, 12-21.
- Serrano, E.; Navarro, R.; Soler, T.; Carbó, J.J.; Lledós, A.; Urriolabeitia, E.P., “Experimental and Computational Study of the Bonding Properties of Mixed Bis-Ylides of Phosphorus and Sulfur”, *Inorg. Chem.* 2009, 48, 6823-6834.
- Sierra, J.D.; Martínez, R.; Hernando, J.; González, M. “The OH + D-2 → HOD plus D angle-velocity distribution: quasi-classical trajectory calculations on the YZCL2 and WSLFH potential energy surfaces and comparison with experiments at E-T=0.28 eV”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2009, 11, 11520-11527.
- Simon-Vázquez R., Lazarova T., Peralvarez-Marín A., Bourdelande J.L., Padros E. “Cross-Linking of Transmembrane Helices Reveals a Rigid-Body Mechanism in Bacteriorhodopsin Transport”, *Angewandte Chemie, International Edition* 2009, 48(45), 8523-8525, S8523/1-S8523/5.
- Soler, L.; Candela, A.M.; Macanás, J.; Muñoz, M.; Casado, J., “In situ generation of hydrogen from water by aluminum corrosion in solutions of sodium aluminate”, *Journal of Power Sources*, 2009, 192, Issue 1, 21-26.
- Soria Soria, E.; Adela Yanez, M.; Murtula, R.; Catalan, V.; Martínez, C.; Ynber, O.; Alonso-Chamarro, J., “Aplicación de sistemas bioanalíticos integrados sobre plataformas de microfluidica en el control de la calidad microbiologica del agua”, *Tecnología del Agua*, 2009, 313, 24-29.
- Torreggiani, A.; Domènech, J.; Orihuela, R.; Ferreri, C.; Atrian, S.; Capdevila, M.; Chatgililoglu, C. “Zinc and Cadmium complexes of a plant metallothionein under radical stress: desulfurisation reactions associated with the formation of trans-lipids in model membranes”, *Chem. Eur. J.*, 2009, 15, 6015-6024.
- Torres, E.; Acosta-Silva, C.; Rúa, F.; Álvarez-Larena, Á.; Parella, T.; Branchadell, V.; Ortuño, R. M., “Synthesis and structural study of novel cyclobutyl beta-peptides”, *Tetrahedron*, 2009, 65, 5669-5675.
- Torres, E.; Gorrea, E.; E. Da Silva, E.; Nolis, P.; Branchadell, V.; Ortuño, R. M., “Prevalence of eight-membered hydrogen-bonded rings in some bis(cyclobutane) beta-dipeptides with trans stereochemistry”, *Org. Lett.*, 2009, 11, 2301-2304.
- Trilla, M.; Pleixats, R.; Wong Chi Man, M.; Bied, C., “Organic-inorganic hybrid silica materials containing imidazolium and dihydroimidazolium salts as recyclable organocatalysts for Knoevenagel condensations”, *Green Chemistry*, 2009, 11, 1815-1820.
- Trillo, B.; López, F.; Montserrat, S.; Ujaque, G.; Castedo, L.; Lledós, A.; Mascareñas, J. L., “Gold-Catalyzed [4C + 3C] Intramolecular Cycloaddition of Allenedienes. Synthetic Potential and Mechanistic Implications”, *Chem. Eur. J.*, 2009, 15, 3336-3339.
- Tristany, M.; Moreno-Mañas, M.; Pleixats, R.; Chaudret, B.; Philippot, K.; Guari, Y.; Matsura, V.; Lecante, P., “Self-assembled Platinum Nanoparticles into Heavily Fluorinated Organic Templates: Effect of the Reactive Gas on the Morphology”, *New Journal of Chemistry*, 2009, 33, 1529-1534.
- Valdés-Ramírez, G.; Gutiérrez, M.; Fournier, D.; Ramírez-Silva, M.T.; Del Valle, M.; Marty, J. L., “Automated resolution of dichlorvos and methylparaoxon pesticide mixtures employing a flow injection system with an inhibition electronic tongue”, *Biosensors and Bioelectronics* 2009, 24, 1103-1108.
- Vallribera, A.; Gimbert, C., “New route to synthesize benzothiazines”, *UAB divulga* (química, marzo 2009).

- Zumeta, I.; Ayllon, J.A.; Gonzalez, B.; Domenech, X., E. Vigil, E. "TiO<sub>2</sub> films obtained by microwave-activated chemical-bath deposition used to improve TiO<sub>2</sub>-conducting glass contact". *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2009 (93), 10, 1728-1732.

### 3.3.4 Treballs de Recerca (Doctorat)

- Aguilo Carreras, Joan. "Complejos mono i dinucleares de Ru con ligandos polipiridílicos. Modelos catalíticos para la oxidación del agua". Direcció: Escriche Martínez, Lluís. Data de lectura: 29/06/09. Programa: Catàlisi Homogènia
- Guasch Camell, Judit. "Materials moleculars multifuncionals basats en sistemes donador-pont-acceptor". Direcció: Veciana Miro, Jaume i Ratera Bastardas, Imma; Palet Ballús, Cristina (tutora). Data de lectura: 17/06/09. Programa: Ciència de Materials.
- López Pérez, Jorge. "First-principles study of high temperature ferroelectric La<sub>2</sub>Ti<sub>2</sub>O<sub>7</sub>". Direcció: Íñiguez González, Jorge; González Lafont, Àngels (tutora). Data de lectura: 24/04/09. Programa: Química Teòrica i Computacional.
- Oliveros Collantes, Malena. "Nuevos radicales policlotrifetilmetilos sustituidos con grupos fosfonatos". Direcció: Veciana Miro, Jaume i Mugnaini, Verónica; Vallribera Massó, Adelina (tutora). Data de lectura: 17/06/09. Programa: Ciència de Materials.
- Tabares Mendoza, Carolina. "Electronic transport through molecules". Direcció: Ordejón Rontome, Pablo; Lledós Falcó, Agustí (tutor). Data de lectura: 03/02/09. Programa: Química Teòrica i Computacional.

### 3.3.5 Tesis

- Acosta Silva, Carles, Adrián. "Estudi teòric d'estructura i la reactivitat de compostos orgànics fosforats". Direcció: Branchadell Gallo, Vicenç. Data de lectura: 12/06/09. Programa: Química Teòrica i Computacional.
- Asensio Montaner, Francisco Javier. "Frangmentacions mesolítiques dels radicals anions de benzil fenil èters, benzil tioèters i clorurs de benzil substituïts". Direcció: Lluch López, Josep M<sup>a</sup> i Marquet Cortés, Jordi. Data de lectura: 27/03/09. Programa: Química.
- Bartes Viñas, Meritxell. "Genosensors based on electrochemical impedance spectroscopy". Direcció: Bayón Rueda, Joan Carles. Data de lectura: 24/04/09. Programa: Catàlisi Homogènia.
- Bautista Mercader, Manuel. "Avances en la aplicacion de la espectroscopia NIR en la industria farmaceutica. Introducción a PAT y técnicas de imagen". Direcció: Blanco Romia, Marcelo. Data de lectura: 03/07/09. Programa: Química.
- Burusco Goñi, Kepa Koldo. "Methodological approach to conformational search. A study case: cyclodextrins". Direcció: Jaime Cardiel, Carlos. Data de lectura: 09/10/09. Programa: Química.
- Cano Sarabia, Antonia María. "Preparación de materiales moleculares nanoparticulados y dispersos -vesículas y microemulsiones- empleando fluidos comprimidos". Direcció: Ventosa Rull, Nora; Veciana Miró, Jaume i Vallribera Massó, Adelina (tutora). Data de lectura: 28/09/09. Programa: Ciencia de Materials.
- Comas Vives, Aleix. "Estudi teòric de reacció d'hidrogenació i d'oxidació en processos de catàlisi homogènia". Direcció: Lledós Falcó, Agustí i Ujaque Pérez, Gregori. Data de lectura: 26/06/09. Programa: Química Teòrica i Computacional.
- Constantino Aguilera, Erika. "Activació dels aminoàcids glicina i lisina i dels seus homòpeptids per cations de Cobalt. Estudis teòrics i d'espectrometria de masses". Direcció: Rodríguez Santiago, Luis i Sodupe Roure, Mariona. Data de lectura: 27/03/09. Programa: Química Teòrica i Computacional.

- Cucarull González, Joan Ramón. “*Estudi teòric i experimental de la reacció de la reacció de fotocicloaddició [2+2] de 2(5H)-furanones a olefines. Modelització i síntesi de compostos ciclohexànics amb activitat tuberculostàtica*” Direcció: Alibés Arqués, Ramón i Font Cierco, Josep. Data de lectura: 19/06/09. Programa: Química.
- Datcu, Angela. “*Polímeros de coordinació porosos, magnéticos y luminiscentes basados en derivados policlorotriphenilmetilicos con iones de metales de transición y lantánidos*”. Direcció: Veciana Miró, Jaume; Roques, Nans i Bourdelande, José Luis (tutor). Data de lectura: 18/12/09. Programa: Ciència dels Materials.
- Farras Costa, Pau. “*Funcionalització de l'anió cobalto-bis(dicarballur) per a nous materials*”. Direcció: Teixidor Bombardó, Francesc i Ros Badosa, Josep (tutor) . Data de lectura: 27/07/09. Programa: Química.
- García Bardají, Gisela. “*(R,R)-hidrobenzoïna com auxiliar quiral en la síntesi de productes naturals en forma enantiopura i de nous compostos amb activitat antituberculosa potencial*”. Direcció: Busqué Sánchez, Félix i de March Centelles, Pere. Data de lectura: 18/06/09. Programa: Química.
- González Gálvez, David. “*Enantioselective approach to securinega alkaloids. Total synthesis or securinine and (-)-norsecurinine*”. Direcció: Figueredo Galimany, Marta i Font Cierco, Josep. Data de lectura: 15/07/09. Programa: Química.
- González Guevara, Johannes Luis. “*Técnicas de separación para el estudio de biosistemas metabolitos de origen vegetal y contaminantes en tejidos dentales*”. Direcció: Valiente Almagro, Manuel. Data de lectura: 14/12/09. Programa: Química.
- Jorge Sobrido, Ana Belén. “*Nuevos oxinitruros de tierras raras y metales de transición con diversas aplicaciones*”. Direcció: Fuertes Miquel, Amparo i Casabó, Jaume (tutor). Data de lectura: 14/05/09. Programa: Ciència de Materials.
- Juárez Pérez, Emilio José. “*Metalodendrimeros y materiales nanoestructurados que incorporan clústeres de boro*”. Direcció: Nuñez Aguilera, M<sup>a</sup> Rosario. Data de lectura: 10/06/09. Programa: Química.
- Lermo Soria, Ana Isabel. “*Nous dissenys biomoleculars en genosensors i immunosensors per a la seguretat alimentaria*”. Direcció: Pividori Gurgo, M<sup>a</sup> Isabel i Alegret Sanromà, Salvador. Data de lectura: 29/06/09. Programa: Química.
- Marin Mancebo, Sergio. “*Synthesis and applications of nanoparticles in biosensing systems*”. Direcció: Alegret Sanromà, Salvador i Merkoçi Hyka, Arben. Data de lectura: 24/04/09. Programa: Química.
- Muntó Garrigós, Maria. “*Micro- i nanoestructuració de materials moleculars funcionals amb fluids comprimits. Desenvolupament de metodologies de preparació i estudis fisicoquímics*”. Direcció: Ventosa Rull, Nora; Veciana Miró, Jaume i Bourdelande Fernández, J. L. (tutor). Data de lectura: 24/04/09. Programa: Ciència dels Materials.
- Orihuela García, Rubén. “*Estudi de l'especificitat metàl·lica i del paper dels lligands sulfur en metal·lotioneïnes (MTs) de diversos organismes*”. Direcció: Capdevila Vidal, Mercè i Bofill Arasa, Roger . Data de lectura: 10/07/09. Programa: Química.
- Ortiz Sánchez, Juan Manuel. “*Excited state intramolecular proton transfer reactions coupled with non adiabatic processes: Electronic structure and quantum dynamical approach*”. Direcció: Gelabert Peiri, Ricard i Moreno Ferrer, Miquel. Data de lectura: 26/11/09. Programa: Química Teòrica i Computacional.
- Parera Piella, Elisabet. “*Micel·les i vesícules metàl·liques a partir de noves fosfines tensioactives. Influència de la coordinació en les propietats d'agregació dels lligands tensioactius*”. Direcció: Suades Ortuño, Joan. Data de lectura: 26/05/09. Programa: Química.
- Parés Franzi, Sònia. “*Síntesi de derivats ciclobutànics enantiomèricament purs. Aproximació sintètica cap al dunnia i el cumacrè*”. Direcció: Alibés Arqués, Ramón i Figueredo Galimany, Marta. Data de lectura: 15/12/09. Programa: Química.
- Pérez López, Briza. “*Carbon nanotubes for electrochemical (bio)sensing*”. Direcció: Merkoçi Hyka, Arben i del Valle Zafra, Manel. Data de lectura: 22/05/09. Programa: Enginyeria de Processos Químics (UPC).

- Rios Font, Raquel. *“Hidròlisi de l'enllaç N-glicosídic a la 2'-desoxiguanosina. Estudis computacionals”*. Direcció: Rodríguez Santiago, Luis i Sodupe Roure, Mariona. Data de lectura: 01/04/09. Programa: Química Teòrica i Computacional.
- Rodríguez Rodríguez, Cristina. *“Lligands quelants multifuncionals per a la malaltia d'Alzheimer”*. Direcció: González Duarte, Pilar. Data de lectura: 04/09/09. Programa: Química.
- Soler Palau, Roger. *“Compostos altament fluorats. Aplicaciones en catàlisi i preparació de nous materials”*. Direcció: Sebastián Pérez, Rosa M<sup>a</sup> i Vallribera Massó, Adelina. Data de lectura: 11/12/09. Programa: Química
- Torres Cano, Elisabet. *“Beta-Pèptids ciclobutànics; Síntesi, estructura i possibles aplicacions”*. Direcció: Ortuño Mingarro, Rosa M<sup>a</sup>. Data de lectura: 28/04/09. Programa: Química.

### **3.6. ORGANITZACIÓ DE CONGRESSOS**

#### **Conferències**

#### **Congressos**

- *Terceras jornadas franco-catalanas de química molecular*. Campus de la Universitat Autònoma de Barcelona (UAB) els dies 15 i 16 de gener de 2009. Organitzat pels grups de Síntesis, Estructura y Reactividad Química y de Modelización Molecular de Sistemas con Metales de Transición. Aquestes jornades reuneixen a un total de 12 grups d' investigació de Barcelona i de Tolosa de Llenguadoc que formen part del *Laboratorio Trans-Pirenaico: de la Molecula a los Materiales*, finançat per la Generalitat de Catalunya i el CNRS francès.

#### **3.6.1. COMITÈ ORGANITZADOR**

#### **3.6.2. COMITÈ CIENTÍFIC**

### **3.7. CONFERÈNCIES IMPARTIDES**

#### **3.7.1. CONFERÈNCIES PLENÀRIES EN CONGRESSOS**

- *“Protonation of transition-metal hydrides: A not so simple process”* Conferència invitada. Lledós Falcó, Agustí. XXXII Reunió Bienal de la Real Sociedad Española de Química, Oviedo, Espanya, setembre 2009.
- *“Reaction Mechanisms of Gold-Catalyzed Organic Transformations”* Conferència plenària. Lledós Falcó, Agustí. Chemistry of Organoelement Compounds: Results and Prospects, Moscú, Rússia, desembre 2009.

#### **3.7.2. CONFERÈNCIES EN CENTRES DE RECERCA I JORNADES CIENTÍFIQUES**

- *“Modelling and simulation in catalysis”*. Lledós Falcó, Agustí. Barcelona Supercomputing Center (BSC), 11 de desembre 2009.

### **3.8. PREMIS REBUTS**

- *Premi d'Excel·lència Investigadora àmbit Ciències Experimentals de la UAB*. Lledós Falcó, Agustí. Obra: “C-H

Oxidate Addition of Bisimidazolium Salts to Iridium and Rhodium Complexes, and N-Heterocyclic Carbene Generation. A Combined Experimental and Theoretical Study”.

- *Premi d'Excel·lència Investigadora àmbit Ciències Experimentals de la UAB.* Gallardo García, Iluminada. Obra: “Evidence for a M Dimer in the Electrochemical Reduction of 1,3,5-Trinitrobenzene: A reversible N<sub>2</sub>-Fixation System”.

### **3.9. CONFERÈNCIES DEL DEPARTAMENT IMPARTIDES A LA UAB**

#### **Cicle de conferències de química**

**- Lourdes F. Vega**

MATGAS, Universitat Autònoma de Barcelona

Títol: *MATGAS com a centre d'excel·lència en CO<sub>2</sub> i temes relacionats amb l'energia. Un entorn de col·laboració entre socis amb objectiu comú.*

27/02/2009

**- Pere Castells**

Departament de Recerca Gastronòmica i Científica de la Fundació Alícia

Títol: *La Recerca científica és present a la cuina?*

26/03/2009

**- Javier Mendoza**

Institut Català d'Investigacions Químiques (ICIQ), Tarragona

Títol: *La química supramolecular en las fronteras de la biología y las ciencias de materiales*

13/05/2009

**- Prof. José Manuel Dominguez-Vera**

Departament de Química Inorgànica

Universidad de Granada

Títol: *La Ferritina en Bioinorgànica y Nanociencia*

09/07/2009

**- Prof. M. Carmen Carreño**

Departament de Química Orgànica

Universidad Autónoma de Madrid

Títol: *El sulfòxido como fuente de quiralidad central, helicoidal, axial y planar*

16/12/2009

#### **Conferències al Departament**

29/04/2009 11:30h

Seminari del Departament de Química

Prof. David J. Aitken

Laboratoire de Synthèse Organique et Méthodologie, Université Paris-Sud XI, Orsay, France.

Títol: *Some Reflections on Synthetic Methodologies for  $\beta$ -Amino Acid and  $\beta$ -Peptide Synthesis.*

Unitat de Química Orgànica

24/07/2009 12:00h

Seminari Departament de Química

Prof. Carlos Roque D. Correia

Instituto de Química, Departamento de Química Orgànica, Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP,

Campinas, Sao Paulo, Brasil

Títol: *New Applications of the Heck Arylations Using Arenediazonium Salts: Synthesis of Pharmacologically Active Compounds and New Ligands for Enantioselective Catalysis.*

Unitat de Química Orgànica

10/09/2009 11:30h

Seminari del Departament de Química

Dr. Stefan Kreiling  
Head of the Epoxy and New Resin R&D platform Henkel AG & Co. KGaA  
Títol: *Challenges in Industrial Research: R&D at Henkel Adhesive Technologies.*  
Unitat de Química Orgànica

27/11/2009 12:00h  
Sala Polivalent (C5/1066) de la Facultat de Ciències  
Dra. Nicole Doelker  
Department of Theoretical and Computational Biophysics, Max Planck Institute for Biophysical Chemistry, Göttingen (Alemanya)  
Títol: *Squeezing through the Pore – Conformational Plasticity in Nuclear Import.*  
Unitat de Química Física

11/12/2009 12:00h  
Seminari del Departament de Química  
Dr. Santiago Schnell  
Research Associate Professor of Computational Medicine and Bioinformatics, University of Michigan, Ann Arbor, MI (USA)  
Títol: *Modelling reactions inside the cells*  
Unitat de Química Física

### 3.10. ESTADES A L'ESTRANGER

- Estruga Ortiga, Marc  
*University of Wisconsin-Madison - Madison (United States of America). 04/05/09 - 30/07/09.*
- Francàs Forcada, Laia  
*Institut für Anorganische Chemie, Georg-August-Universität Göttingen. Göttingen (Germany). 04/05/09 - 02/08/09.*
- Franch Lage, Felicidad  
*University of Copenhagen. Copenhagen (Dinamarca). 15/09/09 - 16/12/09.*
- Garcia Melchors, Maximilià  
*Centre for Catalysis Research and Innovation, University of Ottawa. Ottawa (Canada). 17/07/09 - 23/10/09.*
- Guerrero Hernández, Miguel  
*Laboratoire de Chimie de Coordination (CNRS). Toulouse (França). 09/02/09 - 03/04/09.*
- Moncho Escrivà, Salvador  
*Department of Chemistry, State University of New York at Buffalo. Buffalo (United States of America). 01/05/09 - 31/07/09.*
- Monge Marcet, Amàlia  
*Ecole Nationale Supérieure de Chimie de Montpellier. Montpellier (França). 01/06/09 - 30/06/09.*
- Pacios Pujadó, Maria Mercè  
*Santa Clara University, School of Engineering, Department of Electrical Engineering. Santa Clara (United States of America). 01/02/09 - 01/08/09.*
- Tello López, Ignacio  
*Universidad Nacional Autónoma de México, Facultad de Química. México, D.F. (México). 24/03/09 - 13/04/09.*

### 3.11. RESUM DE LES ACTIVITATS DE RECERCA 2009

<b>Projectes d'investigació</b> .....	43
Grups de recerca .....	18
Grups de recerca consolidats .....	12
<b>Resum de financiació de la recerca</b> .....	Total generat 3.024.996,12 €
<b>Conferències del departament impartides a la UAB</b> .....	10
<b>Treballs de recerca (Doctorat)</b> .....	5
<b>Tesis Doctorals</b> .....	28
<b>Estades a l'estranger</b> .....	9
<b>Professors i Investigadors visitants</b> .....	27

**Publicacions**

<b>Llibres</b> -----	<b>0</b>
<b>Capítols de llibre</b> -----	<b>0</b>
<b>Articles</b> -----	<b>157</b>

<i>Accounts of Chemical Research</i>	1
<i>AlchE Journal</i>	1
<i>Alimentaria</i>	1
<i>Analyst</i>	1
<i>Analytical Biochemistry</i>	1
<i>Analytica Chimica Acta</i>	1
<i>Analytical and Bioanalytical Chemistry</i>	2
<i>Analytical Chemistry</i>	3
<i>Angewandte Chemie International Edition in English</i>	4
<i>Applied Catalysis, B: Environmental</i>	1
<i>Applied Physics A-Materials Science and Processing</i>	1
<i>Australian Journal of Chemistry</i>	2
<i>Bioorganic Medicinal Chemistry</i>	1
<i>Biosensors &amp; Bioelectronics</i>	4
<i>Canadian Journal of Chemistry</i>	2
<i>Chemical Communications</i>	1
<i>Chemical Physics</i>	1
<i>Chemical Society Review</i>	1
<i>Chemistry Letters</i>	1
<i>Chemistry European Journal</i>	6
<i>ChemSusChem</i>	2
<i>Communications in Soil Science and Plant Analysis</i>	1
<i>Coordination Chemistry Reviews</i>	1
<i>Dalton Transactions</i>	5
<i>Desalination</i>	1
<i>Electroanalysis</i>	2
<i>Electrochimica Acta</i>	1
<i>European Journal of Inorganic Chemistry</i>	1
<i>European Journal of Organic Chemistry</i>	1
<i>FEBS Journal</i>	1
<i>Fibers and Polymers</i>	1
<i>Green Chemistry</i>	1
<i>Human Molecular Genetics</i>	1
<i>Industrial and Engineering Chemical Research</i>	1
<i>Ingenieria Química</i>	1
<i>Inorganic Chemistry</i>	7
<i>Inorganic Chemistry Communications</i>	2
<i>Inorganica Chimica Acta</i>	3
<i>International Journal of Molecular Sciences</i>	1
<i>Journal of Analytical Atomic Spectrometry</i>	1

<i>Journal of Computational Chemistry</i>	3
<i>Journal of Coordination Chemistry</i>	1
<i>Journal of Electrostatics</i>	1
<i>Journal Inc. Phen. Mac. Chem.</i>	1
<i>Journal of Labelled Compounds and Radiopharmaceuticals</i>	1
<i>Journal of Membrane Science</i>	1
<i>Journal of Molecular Structure</i>	2
<i>Journal of Nanomaterials</i>	1
<i>Journal of Nanoscience and Nanotechnology</i>	1
<i>Journal of Organic Chemistry</i>	5
<i>Journal of Pharmaceutical Innovation</i>	1
<i>Journal of Physical Chemistry A</i>	4
<i>Journal of Physical Chemistry B</i>	2
<i>Journal of Physical Chemistry C</i>	4
<i>Journal of Power Sources</i>	1
<i>Journal of The American Chemical Society</i>	8
<i>Journal of Thermal Analysis and Calorimetry</i>	1
<i>Journal of The Society of Leather Technology and Chemist</i>	1
<i>Lab on a Chip</i>	1
<i>Lifescienceslab</i>	1
<i>Medi Ambient, Tecnologia i Cultura</i>	1
<i>Metallomics</i>	1
<i>Microbial Cell Factories</i>	1
<i>Nanoscale</i>	1
<i>Nanotechnology</i>	2
<i>Neural Networks World Journal</i>	1
<i>New Journal of Chemistry</i>	1
<i>Organic Letters</i>	4
<i>Organic and Biomolecular Chemistry</i>	2
<i>Organometallics</i>	2
<i>Physical Chemistry Chemical Physics</i>	4
<i>Polyhedron</i>	1
<i>Small</i>	1
<i>Solar Energy Materials and Solar Cells</i>	1
<i>Synlett</i>	1
<i>Supramolecular Chemistry</i>	1
<i>Talanta</i>	5
<i>Tecnologia del Agua</i>	1
<i>Tetrahedron</i>	4
<i>Theoretical Chemistry Accounts</i>	6
<i>Thin Solid Films</i>	1
<i>Topics in Catalysis</i>	1
<i>Water Research</i>	1