

**Memòria d'Activitats del  
Departament de Química  
2007**

## INDEX

Direcció	2
Professorat	2
Professors Visitants (Convidats i /o en Període Sabàtic)	4
Becaris de postgrau i postdoctorals	4
Tècnics i Investigadors Contractats de Projectes d'investigació	4
Beques de col·laboració del Ministeri d'Educació i Ciència	4
Alumnes visitants	4
Alumnes col·laboradors UIB ( tipus A)	5
Alumnes col·laboradors UIB ( tipus B)	5
Activitats docents	
Primer i segon cicle de grau	5
Postgrau	
Màster en Ciència i Tecnologia Química 2006-2007.	5
Programa de Doctorat en Ciències Experimentals i Tecnologies (Ciència i Tecnologia Química) 2006-2007.	6
Programa de Doctorat Interuniversitari de Tercer Cicle Nacional de Química Teòrica i Computacional. Curs acadèmic 2006-2007.	6
Programa de doctorat interuniversitari en "Química Orgànica en la Indústria Químic-Farmacèutica".	6
Altres cursos de doctorat	6
Màsters no oficials	7
Altres cursos	7
Conferències, seminaris i taules rodones	7
CÀTEDRA FUNDACIÓN MAPFRE	7
Activitats de recerca dels grups	
Enginyeria d'aliments	9
Anàlisi Química Aplicada	10
Litiasi renal i biomineralització	11
Química analítica, automatització i medi ambient	14
Química bioinorgànica i biorgànica	19
Química inorgànica	21
Química supramolecular	22
Reactivitat molecular i disseny de fàrmacs	24
Activitats de recerca fora de grups	25

## DEPARTAMENT DE QUÍMICA

**Director/a:** Josefa Donosa Pardo

**Subdirector/a:** Catalina Genestar Julià

**Secretari/a:** Susana Simal Florindo

<b>Personal</b>	<b>Situació acadèmica</b>	<b>Dedicació</b>
Cerdà Martín, Víctor	CU	temps complet
Costa Torres, Antoni	CU	temps complet
Deyà Serra, Pere M.	CU	temps complet
Donoso Pardo, Josefa	CU	temps complet
Grases Freixedas, Fèlix	CU	temps complet
Muñoz Izquierdo, Francisco	CU	temps complet
Otero Arean, Carlos	CU	temps complet
Rosselló Matas, Carme	CU	temps complet
Saá Rodríguez, José Manuel	CU	temps complet
Ballester Balaguer, Pau	TU	temps parcial
Bergueiro López, José	TU	temps complet
Estela Ripoll, Josep Manuel	TU	temps complet
Femenia Marroig, Antoni	TU	temps complet
Fiol Arbós, Joan Jesús	TU	temps complet
Forteza Coll, Rafel	TU	temps complet
Frau Munar, Joan	TU	temps complet
García Raso, Àngel	TU	temps complet
Genestar Julià, Catalina	TU	temps complet
Llobera Balle, Antònia	TU	temps complet
March Isern, Joan Gabriel	TU	temps complet
Miró Lladó, Manuel	Inv. Cont. Ramon y Cajal ; TU temps complet	temps complet
Morey Salvà, Jeroni	TU	temps complet
Palou Franco, Josefina	TU	temps complet
Simal Florindo, Susana	TU	temps complet
Terron Homar, Àngel	TU	temps complet
Turnes Palomino, Gemma Isabel	TU	temps complet
Vilanova Canet, Bartomeu	TU	temps complet
Estella Escudero, Juana	TEU	temps complet
Frontera Beccarà, Antoni	Prof. Contract.Dr. (I3)	temps complet
Rotger Pons , Carmen	Prof. Contract.Dr. (I3)	temps complet
Quiñonero Santiago, David	Inv. Cont. Juan de la Cierva	temps complet
Simonet Suau, Bartomeu	Prof. Aj. Dr.	temps complet
Adrover Estelrich, Miquel	Aj.	temps complet
Ortega Castro, Joaquín	Aj.	temps complet
Rodríguez Delgado, Montserrat	Aj.	temps complet
Adrover Fiol, Bartomeu	Prof. Assoc.	temps parcial
Herrero Aisa, Luis Àngel	Prof. Assoc.	temps parcial
López Zafra, Adela	Prof. Assoc.	temps parcial
Salvà Salvà, Antoni	Prof. Assoc.	temps parcial
Capo Cañellas, Magdalena	Prof. Assoc.	temps parcial
Cerdà Lacaci, Amalia	Prof. Assoc.	temps parcial
Perello Bestard, Joan	Prof. Assoc.	temps parcial

Rumori, Paolo	Prof. Assoc.	temps parcial
Tomás Berga, Damià	Prof. Assoc.	temps parcial
Vergés Aguiló, Agustín	Prof. Assoc.	temps parcial

### **Professors Visitants (Convidats i /o en Període Sabàtic)**

Alpízar Lorenzo, Jesús  
Djamaladdin Musaev  
Fedotov, Petr  
Suarez Pérez, Yania

### **Becaris de postgrau i postdoctorals**

Albertí Aguiló, Francisca Becaria CAIB  
Barceló Oliver, Miquel Becari CAIB  
Burkhard Horstkotte Becari CAIB/Becari UIB  
Castell Palou, M.Africa Becaria FPU  
Eim, Valeria Soledad Becaria CAIB/Becaria UIB  
Fernàndez Rodríguez, Mailen Becaria UIB/Becaria CAIB  
Gomila Ribas, Margalida Becària FPI  
Isern Amengual, Bernat Becari CAIB  
Mansilla Castejada, Javier Becari CAIB  
Maya Alejandro, Fernando Becari CAIB  
Rosende Mustillo, Maria Becaria UIB i Becaria CAIB  
Sampedro Palerm, Àngel Becari UIB  
Sanchis Cortes, M. del Pilar Becaria FPU  
Serra Hernández, Antonio Miguel Becari FPI  
Soberats Reus, Bartomeu Becari CAIB

### **Tècnics i Investigadors Contractats de Projectes d'investigació**

Coll Crespí, Miquel Titular Superior DD  
Ferrer Trovato, Laura Daniela Titular Superior DD  
Gonzalez Centeno, M.de los Reyes Tècnica Especialista DD  
Moreno García-Luengo, Silvia Titular Superior DD  
Pons Bonafé, M. del Carmen Titular Superior DD  
Santos Oliver, Amalia Titular Superior DD  
Serra Socias, Francisca Titular Superior DD  
Tur Espinosa, Fernando Titular Superior DD  
Vega Reynes, Manuel Tèctic de Recerca DD  
Piña Villalonga, Juana Maria Titular Superior DD  
Llinares Baixauli, Irene Titular Superior DD

### **Beques de col·laboració del Ministeri d'Educació i Ciència**

Aguiló Carreras, Joan  
Escudero Masa, Daniel  
Fiol Bibiloni, Gabriel

### **Alumnes Visitants**

Joana Ribeiro Universidad Católica Portuguesa. Oporto

## **Alumnes col·laboradors UIB ( tipus A) (Curs 2007, FOU Núm.279)**

Caldés Melis, Catalina  
Casado Férrez, Marcos  
Casasnovas Perera, Rodrigo  
Días Bermúdez, Belén  
Estarellas Martín, Carolina  
Fernández Peyeras, David  
González Barea, Amparo  
Hernández Castillo, Alberto  
Málaga Barceló, Xavier  
Martínez Brodie, Luis  
Martínez Crespo, Luis  
Mauro Pou, Silvia  
Oneto Carmona, Beatriz  
Párraga Párraga, David  
Pons Pérez, Frances  
Soler Trias, Antonia  
Suárez Sánchez, Ruth  
Torres Juan, Marta  
Vicens Garau, María Antonia

## **Alumnes col·laboradors UIB ( tipus B)**

Ruiz Castillo, Raquel

## **Activitats docents**

### **Primer i segon cicle de grau**

1er i 2n de la llicenciatura de Química.

Els programes de les assignatures es poden trobar a la web de la UIB:

<http://www.uib.es/estudis/quimica/pla.html>

Col·laboració en els estudis de:

Llicenciatura de Biologia

Els programa de les assignatures es poden trobar a la web de la UIB:

<http://www.uib.es/estudis/biologia/pla.html>

Llicenciatura de Bioquímica

Els programa de les assignatures l'assignatura es poden trobar a la web de la UIB:

<http://www.uib.es/estudis/bioquimica/pla.html>

Enginyeria Tècnica Agrícola, especialitat en Hortofruticultura i Jardineria.

Els programa de les assignatures es poden trobar a la web de la UIB:

[http://www.uib.es/estudis/et\\_agricola/pla.html](http://www.uib.es/estudis/et_agricola/pla.html)

### **Postgrau**

#### **1. Màster en Ciència i Tecnologia Química 2006-2007.**

Mòduls:

- Química Biològica, Biomèdica i Sanitària
- Química Orgànica
- Automatització del laboratori químic i Química del Medi Ambient
- Enginyeria Agroalimentària
- Química i Física de Materials
- Divulgació i ensenyament de la Química

Els programes de les assignatures es poden trobar a la web del departament:

<http://www.uib.es/depart/dqu/paginas/master.htm>

**- 2. Programa de Doctorat en Ciències Experimentals i Tecnologies (Ciència i Tecnologia Química) 2006-2007.** Organitzat pel Departament de Química de la UIB

Amb menció de Qualitat del Ministeri d'Educació i Ciència. (MCD2006-00571)

Informació: <http://www.uib.es/depart/dqu/paginas/doctorado.htm>

**- 3. Programa de Doctorat Interuniversitari de Tercer Cicle Nacional de Química Teòrica i Computacional. Curs acadèmic 2006-2007.** Amb menció de Qualitat del Ministeri d'Educació i Ciència.

Universitats que hi participen i noms dels professors coordinadors:

- Universitat Autònoma de Madrid (UAM). O. Mo
- Universitat Autònoma de Barcelona (UAB). J. M. Lluch
- Universitat Complutense de Madrid (UCM). J. Aoiz
- Universitat de Barcelona (UB). F. Illes
- Universitat d'Extremadura (UEX). M. Aguilar
- Universitat de Girona (UDG). M. Sola
- Universitat de les Illes Balears (UIB). F. Muñoz
- Universitat Jaume I (UJI). J. Andrés
- Universitat del País Basc (UPV). J. Ugalde
- Universitat de Salamanca (USA). J. M. Alvariño
- Universitat de Sevilla (US). E. Sánchez
- Universitat de València (UV). I. Nebot
- Universitat de Valladolid (UVA). A. Largo
- Universitat Rovira i Virgili (URV). J. M. Ricart
- Universitat de Santiago de Compostela (USC). S. Vázquez
- Universitat de Oviedo (UOV). A. Martín
- Universitat de Granada (UGR). D. Portal
- Universitat de Girona (UDG). M. Sol

**- 4. Programa de doctorat interuniversitari en "Química Orgànica en la Indústria Químic-Farmacèutica".**

Universitat coordinadora: Universitat de València. Altres universitats que hi participen:

- Universitat de Barcelona (UB).
- Universitat de les Illes Balears (UIB).
- Universitat del Politècnica de València (UPV).
- Universitat de València (UV).
- Universitat Jaume I (UJI).
- Universitat Cardenal Herrera-CEU (UCE-CEU)
- Universitat Miguel Hernández (UMH)
- Universitat d'Alacant (UA).
- Universitat de Saragossa (UZAR)

**- 5. Altres cursos de doctorat**

- "Simulación y Control de Procesos en las Industrias Agroalimentarias".

Dra. Carmen Rosselló Matas. Del Programa de Doctorat "Tecnologia d'Aliments" Edició 2005-2005, amb Menció de Qualitat del MEC. Universitat Politècnica de València.

- "Caracterización de Sólidos Inorgánicos" Dr. Carlos Otero Arean. Edició 2005-2005. Programa de Doctorado "Química Organometálica" de la Universidad de Oviedo.

- "Reactividad y propiedades de los Sólidos Inorgánicos" Dra. Gemma Turnes Palomino.

Edició 2005-2005. Programa de Doctorado "Química Organometálica" de la Universidad de Oviedo

- "Síntesis y Catálisis Asimétrica" Dr. José M. Saá Rodríguez. Programa de Doctorado de la Universidad del País Vasco "Estudios Avanzados en Química Fundamental y Aplicada" (mención de calidad del MEC). Edición de Julio 2007.

#### - 6. Màsters no oficials

- Màster en salut laboral" (nivell superior). 8a edició. Responsable: Dr. Pere M. Deyà Serra.
- Curso de Métodos electroanalíticos en el campo del medio ambiente. Víctor Cerdà. Màster de Ciencias y Tecnología Ambiental. Universidad de La Coruña

#### Altres cursos

##### - Sisena Escola de Química Teòrica de la UIB.

Director: Prof. Francisco Muñoz, Catedràtic de Química Física, Departament de Química.  
Subdirector : Prof. Juan Frau, professor Titular de Química Física, Departament de Química.

Altres Professorat: *Dr. A. Hernández Laguna*, Investigador del CSIC, Estación Experimental del Zaidín, Granada. *Dr. F. Javier Luque*, Catedràtic de Química Física. Facultat de Farmàcia.

Universitat de Barcelona.

##### - En col·laboració amb el Col·legi Oficial de Químics de les Illes Balears i l'Associació de Químics de les Illes Balears.

- Realització de Projectes Químics. 2 crèdits. Del 2 al 6 de juliol de 2007.
- La Ciència a l'Art. 1,5 crèdits
- Productes agroalimentaris de les Illes Balears. 3 crèdits.
- Curs de gestió mediambiental. 5 crèdits. De 10 de setembre a 11 d'octubre de 2007
- Aplicació de les Tècniques instrumentals a l'àmbit professional. 1,5 Crèdits. Del 24 a 28 de Setembre de 2007.
- Sortides professionals relacionades amb la Química. 1,5 crèdits. De l'1 al 10 d' Octubre. Coordinador: Dr. Juan Frau Munar
- Fites de la Química en el desenvolupament científic. 1 crèdit. Coordinador: Dr. Juan Frau Munar

#### Conferències, seminaris i taules rodones

- Presentació del llibre "*Els Professionals de la Química a les Illes Balears*" a càrrec dels autors, Dr. Enrique Gómez i Dr. Ángel García-Raso. 15 de novembre de 2007, del Dia de la Química.

- **Jornada de Portes Obertes del Departament de Química.** Dia 22 de Febrer de 2007 i coincidint amb la [XX edició de l'Olimpíada de Química de les Illes Balears](#) es va dur a terme una Jornada de Portes Obertes del Departament de Química per l'alumnat de secundària participant en la Olimpíada.

#### CÀTEDRA FUNDACIÓN MAPFRE

La Càtedra Fundació MAPFRE es va crear en virtut d'un acord marc entre les fundacions MAPFRE i MAPFRE MEDICINA, i la UIB i té com objectiu el desenvolupament d'activitats formatives i d'investigació en el camp de la prevenció de riscos laborals en el sentit més ampli. Les activitats que es duen a terme són finançades per les Fundacions MAPFRE i MAPFRE MEDICINA, i organitzades i coordinades per la UIB.

**Activitats**

Màster en Salut Laboral.

Assignatura "Prevenió de Riscos Laborals" (codi 3484)

Premi Projecte/Treball Fi de carrera sobre Prevenió de Riscos Laborals.

## Activitats dels grups de recerca

### Enginyeria d'aliments

#### Línies de recerca:

Enginyeria d'aliments: simulació de processos

#### Equip investigador:

##### Investigador principal

Dra. Carme Rossello Matas (Catedràtica d'Universitat)

##### Membres

Dr. Antoni Femenia Marroig (Titular d'Universitat)

Dra. Susana Simal Florindo (Titular d'Universitat)

Dr. Jaime Cañellas Mut

Dr. Miquel Frau Caldentey

Sra. Carme Garau Taberner (Investigadora Contractada)

Sra. Valeria Soledad Eim (Becària FPI)

Sra. Maria Africa Castell Palou (Becària FPI-FPU)

##### Col·laboradors

Dr. Angel Berna Prats

Dr. José Bon Corbín

Dr. Antonio Mulet Pons

#### Publicacions en llibres

**Autors:** Rosselló, C.; Simal, S.; Femenia, A.; Garau, C.; Castell, A. **Títol:** 'Deshidratació solar de pebre vermell de la varietat Tap de cortí'. **Referència:** Quaderns d'Investigació. **Clau:** Llibre.

**Autors:** Rosselló, C.; Bestard, I.; Cañellas, J.; Femenia, A.; Simal, S. **Títol:** 'Guia de Tast de l'oli de Mallorca.' **Clau:** Llibre.

**Autors:** Rosselló, C.; Femenia, A.; Simal, S.; Garau, C. **Títol:** 'Estudi sobre la viabilitat d'utilitzar els excedents i residus agrícoles del camp mallorquí con a fibra dietètica.' **Clau:** Llibre.

**Autors:** Castell-Palou, A.; Simal, S.; Frau, M.; Eim, V.S.; Femenia, A.; Rosselló, C. **Títol:** 'Application of multivariate statistical analysis for the quality control of food products.' **Referència:** ECCE-6 Book of Abstracts. **Clau:** Capítol de llibre.

#### Publicacions en revistes internacionals

**Autors:** Simal, S.; Femenia, A.; Castell-Palou, A.; Rosselló, C. **Títol:** 'Water desorption thermodynamic properties of pineapple.' **Revista:** Journal of Food Engineering. **Pàgina inicial:** 1293 **Pàgina final:** 1301 **Clau:** Article.

**Autors:** Bon, J.; Rosselló, C.; Femenia, A.; Eim, V.; Simal, S. **Títol:** 'Mathematical modelling of drying kinetics for apricots: Influence of the external resistance to mass transfer.' **Revista:** Drying Technology. **Clau:** Article.

**Autors:** Garau, M.C.; Simal, S.; Rosselló, C.; Femenia, A. **Títol:** 'Effect of air-drying temperature on physico-chemical properties of dietary fibre and antioxidant capacity of aornage (Citrus aurantium v. Canoneta) by-products.' **Revista:** Food Chemistry. **Volum:** 104 **Pàgina inicial:** 1014 **Pàgina final:** 1024 **Clau:** Article.

**Autors:** Cárcel, J.A.; Bedito, J.; Rosselló, C.; Mulet, A. **Títol:** 'Influence of ultrasound intensity on mass transfer in apple immersed in a sucrose solution.' **Revista:** Journal of Food Engineering. **Volum:** 78 **Pàgina inicial:** 472 **Pàgina final:** 479 **Clau:** Article.

**Autors:** Femenia, A.; Simal, S.; Garau, C.; Rosselló, C. **Títol:** 'Effects of Heat Treatment and Dehydration on Pineapple (Ananas comosus L. Merr) Cell Walls.' **Revista:** International Journal of Food Engineering. **Volum:** 3 **Pàgina inicial:** 1 **Pàgina final:** 14 **Clau:** Article.

**Autors:** Alves-Filho, O.; Eikevick, T.; Mulet A.; Garau, M.C.; Rosselló, C. **Títol:** 'Kinetics of mass transfer during atmospheric freeze drying of red pepper.' **Revista:** Drying Technology. **Volum:** 25 **Pàgina inicial:** 1155 **Pàgina final:** 1161 **Clau:** Article.

#### Contribucions a Congressos

**Autors:** Alves-Filho, O.; Eikevik, T.M.; Castell Palou, A. **Títol:** Heat pump technology applied to mallorquín cheese curing and drying. **Congrés:** AFSIA 2007 European Drying Conference. **Tipus de participació:** Ponència.

**Autors:** García-Pérez, J.V.; Cárcel, J.A.; Rosselló, C.; De la Fuente, S.; Mulet, A. **Títol:** Drying of porous materials as affected by power ultrasound. **Congrés:** AFSIA 2007. **Tipus de participació:** Ponència.

**Autors:** Montaña, J.J.; Palou, M.; González, M.; Jiménez, R.; Rosselló, C.; Salinas, I. **Títol:** Evaluación del trabajo presencial y no presencial del profesorado y del alumnado en dos titulaciones impartidas mediante créditos ECTS en la Universitat de les Illes Balears. **Congrés:** II Jornadas Nacionales de Metodologías ECTS **Tipus de participació:** Ponència.

**Autors:** Eim, V.S.; Femenia, A.; Castell, A.; González, B.R.; Simal, S. **Títol:** Modelling of the drying curves of a fibre enriched sausage (Sobrassada) **Congrés:** AFSIA 2007 European Drying Conference. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Castell-Palou, A.; Simal, S.; Frau, M.; Eim, V.S.; Femenia, A.; Rosselló, C. **Títol:** Application of Multivariate statistical analysis for the quality control of food products. **Congrés:** European Congress of Chemical Engineering (ECCE-6) **Tipus de participació:** Presentació comunicació.

### Projectes

- Referència: Grupo de Ingeniería de Alimentos (Ingeniería Química). Carme Rosselló Matas.
- Referència: Red temática: PROCESOS ALIMENTARIOS Resolució de 12/12/06. BOIB 184, 23/12/06. Carme Rosselló Matas.
- Referència: AGL2006-14146-C02-02/ALI. Secado intermitente de productos alimentarios: Influencia de las variables de proceso en la calidad del producto final. Carme Rosselló Matas.
- Referència: Estudi per a la identificació dels aliments tradicionals de les Illes Balears característics de la dieta mediterrània. Carme Rosselló Matas.
- Referència: BIA013/06. Vida útil de l'Ensaïmada de Mallorca: ús de tècniques d'envasat en atmosfera modificada. Carme Rosselló Matas.
- Referència: BIA014/06. L'anàlisi sensorial com a eina de control de qualitat i millora de processos: Aplicació al Flaó d'Eivissa. Susana Simal Florindo.
- Referència: BIA012/06. Aprofitament de subproductes agroalimentaris de les Illes Balears. Antoni Femenia Marroig.
- Referència: BIA17/07. Estudio de las variables involucradas en el análisis sensorial de la Ensaïmada de Mallorca en vistas a mejorar la exactitud y precisión del análisis. Ajudes per a la investigació en matèria d'agricultura i pesca en l'àmbit de les Illes Balears. BOIB núm. 13, 01-09-2007. Carmen Rosselló Matas.
- Referència: Viabilitat d'utilitzar excedents i subproductes agroalimentaris de les Illes Balears per a l'obtenció de bioetanol. Ajudes per a la investigació en matèria d'agricultura i pesca en l'àmbit de les Illes Balears. BOIB núm. 13, 01-09-2007. Antoni Femenia Marroig

## Anàlisi Química Aplicada

### Línies de recerca:

- Disseny de dispositius
- Materials del patrimoni historicoartístic
- Recursos hídrics

### Equip investigador:

#### Investigador principal

Dr. Joan Gabriel March Isern (Titular d'Universitat)

#### Membres

- Dra. Catalina Genestar Julia (Titular d'Universitat)
- Dra. Josefina Palou Franco (Titular d'Universitat)
- Dr. Bartolomé Miguel Simonet Suau

### Publicacions en llibres

**Autors:** Salvador, A.; March, J.G.; Vidal, M.T.; Chisvert, A.; Balaguer, A. **Títol:** 'General review of published Analytical Methods'. **Referència:** Analysis of cosmetic products. **Clau:** Capítol de llibre.

**Autors:** Balaguer, A.; Chisvert, A.; Sisternes, J.; March, J.G.; Salvador, A. **Títol:** 'Analytical methods for actives used in general and specific skin-care, personal hygiene and other toiletry products (excluding those mentioned in previous chapters)'. **Referència:** Analysis of cosmetic products. **Clau:** Capítol de llibre.

### Publicacions en revistes internacionals

**Autors:** Genestar, C.; Pons, C. **Títol:** 'Analytical characterization of biodegraded wood from a 15th century Spanish cloister.' **Revista:** Microchimica Acta. **Pàgina inicial:** 1 **Pàgina final:** 7 **Clau:** Article.

**Autors:** March, J.G.; Gual, M. **Títol:** 'Breakpoint chlorination curves of greywater.' **Revista:** Water Environment Research. **Volum:** 79 **Pàgina inicial:** 828 **Pàgina final:** 832 **Clau:** Article.

**Autors:** March, J.G.; Simonet, B.M. **Títol:** 'A green method for the determination of hypochlorite in bleaching products based on its native absorbance.' **Revista:** Talanta. **Volum:** 73 **Pàgina inicial:** 232 **Pàgina final:** 236 **Clau:** Article.

### Contribucions a Congressos

**Autors:** Genestar, C.; Pons, C. **Títol:** Effects of environmental factors on cultural heritage in Palma de Mallorca. **Congrés:** IX International Symposium on Analytical Methodology in the environmental field (IX IASMEF) **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Horstkotte, B.; Orleans, N.E.; March, J.G.; López de Alba, P.L.; Cerdà, V. **Títol:** Multisyringe flow injection analysis for the hypochlorite determination in untreated cleaning agents applying green methodology. **Congrés:** IX International symposium on Analytical Methodology in the Environmental Field. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Genestar, C. **Títol:** 'La Química i la conservació del patrimoni històrico-artístic.' **Congrés:** Curs 'La Ciència a l'Art' organitzat per l'Associació de Químics de les Illes Balears dins els actes de 'l'Any de la Ciència'. Palma de Mallorca. Octubre. **Tipus de participació:** Conferència.

### Projectes

- Referència: CTQ2006-01851/BQU. Diseño y validación de nuevos sistemas de tratamiento de muestra directamente acoplados a espectrómetros de masas. Juan Gabriel March Isern; Catalina Genestar Julia; Josefina Palou Franco.

### Altres activitats

**Títol :** Bens Culturals: Degradació i Conservació. Visita a les dependències del Servei Científicotècnic de la UIB. Palma de Mallorca. **Data:** Desembre. **Denominació del acte :** Cicle 13: 'Bens Culturals: Degradació i Conservació'. Art i Ciència, organitzat per la Conselleria d'Economia, Hisenda i Innovació. Autor : Dra. C. Genestar.

**Activitat:** Informe Analític de les Pintures Murals del Convent de Sant Bonaventura de Lluçmajor (Mallorca) **Dates:** Del 15 de març al 15 d'octubre. **Àmbit:** Local. **Classificació:** Realització d'Informes Tècnics per encàrrec. Autor : Dra. C. Genestar.

**Activitat:** Informe Analític sobre les Pintures Murals de l'Església del Convent de Sant Bonaventura de Lluçmajor (Mallorca) **Dates:** Del 20 de maig al 28 de novembre. **Àmbit:** Local. **Classificació:** Realització d'Informes Tècnics per encàrrec Autor : Dra. C. Genestar.

### Litiasi renal i biomineralització

#### Línies de recerca:

Litiasi renal, etiologia, diagnòstic i tractament  
Biomineralització  
Estudis de les calcificacions patològiques

#### Equip investigador:

##### Investigador principal

Dr. Felix Grases Freixedas (Catedràtic d'Universitat)

##### Membres

Dra. Antonia Costa Bauza (Titular d'Escola Universitària)  
Dr. Rafael Maria Prieto Almirall (Titular d'Escola Universitària)  
Dr. Joan Perello Bestard (Professor Associat)  
Dr. Antonio Conte Visus  
Dr. Ramón García González  
Dra. Ana M. García Raja  
Dra. Margarita Ramis Barceló

Sra. Maria Del Pilar Sanchis Cortes (Investigadora Contractada FPI-FPU)  
Sra. Isabel Gomila Muñoz (Becària CAIB)  
Sr. Bernat Isern Amengual

#### **Col·laboradors**

Dr. Enrique Carmelo Pieras Ayala

#### **Publicacions en revistes internacionals**

**Autors:** Grases, F.; Isern, B.; Sanchis, P.; Perelló, J.; Torres, J.J.; Costa-Bauzá, A. **Títol:** 'Phytate acts as an inhibitor in formation of renal calculi'. **Revista:** Frontiers in Bioscience. **Volum:** 12 **Pàgina inicial:** 2580 **Pàgina final:** 2587 **Clau:** Article.

**Autors:** Grases, F.; Sohnel, O.; Costa-Bauzá, A.; Pieras, E.; Muñoz, D. **Títol:** 'Structural features of three ureterocele calculi.' **Revista:** International Urology and Nephrology. **Volum:** 39 **Pàgina inicial:** 765 **Pàgina final:** 769 **Clau:** Article.

**Autors:** Grases, F.; Sanchis, P.; Isern, B.; Perello, J.; Costa-Bauzá, A. **Títol:** 'Uric acid as inducer of calcium oxalate crystal development.' **Revista:** Scandinavian Journal of Urology and Nephrology. **Volum:** 41 **Pàgina inicial:** 26 **Pàgina final:** 31 **Clau:** Article.

**Autors:** Costa-Bauzá, A.; Ramis, M.; Montesinos, V.; Grases, F.; Conte, A.; Piza, P.; Pieras, E. **Títol:** 'Type of renal calculi: variation with age and sex.' **Revista:** World Journal of Urology. **Volum:** 25 **Pàgina inicial:** 415 **Pàgina final:** 421 **Clau:** Article.

**Autors:** Grases, F.; Perello, J.; Isern, B.; Costa-Bauzá, A. **Títol:** 'Myo-inositol hexakisphosphate (phytate) inhibits calcium carbonate crystallization in hard water.' **Revista:** Water SA **Volum:** 33 **Pàgina inicial:** 749 **Pàgina final:** 754 **Clau:** Article.

**Autors:** Grases, F.; Sanchis, P.; Perello, J.; Isern, B.; Prieto, R.M.; Fernandez-Palomeque, C.; Torres, J.J. **Títol:** 'Effect of crystallization inhibitors on vascular calcifications induced by vitamin D: a pilot study in Sprague-Dawley rats.' **Revista:** Circulation Journal. **Volum:** 71 **Pàgina inicial:** 1152 **Pàgina final:** 1156 **Clau:** Article.

**Autors:** Touhami, M.; Laroubi, A.; Elhabazi, K.; Loubna, F.; Zrara, I.; Eljahiri, Y.; Oussama, A.; Grases, F.; Chait, A. **Títol:** 'Lemon juice has protective activity in a rat urolithiasis model.' **Revista:** BMC Urology. **Volum:** 7 **Pàgina inicial:** 18 **Pàgina final:** 27 **Clau:** Article.

**Autors:** Grases, F.; Perello, J.; Isern, B.; Costa-Bauzá, A. **Títol:** 'The relationship between high fluoride intake and nephrolithiasis.' **Revista:** Current Urology. **Volum:** 1 **Pàgina inicial:** 155 **Pàgina final:** 160 **Clau:** Article.

**Autors:** Grases, F.; Sanchis, P.; Costa-Bauzá, A.; Bonnín, O.; Isern, B.; Perelló, J.; Prieto, R.M. **Títol:** 'Phytate inhibits bovine pericardium calcification in vitro.' **Revista:** Cardiovascular Pathology. **Clau:** Article.

#### **Contribucions a Congressos**

**Autors:** Grases, F. **Títol:** Desarrollo de las calcificaciones del sistema cardiovascular con la edad. **Congrés:** 49<sup>o</sup> Congreso de la Sociedad Española de Geriatria y Gerontología. **Tipus de participació:** Conferència invitada.

**Autors:** Grases, F. **Títol:** El agua en la dieta mediterránea: tipos de agua. **Congrés:** Fórum internacional d'Investigació en Cuina i Nutrició a la Mediterrània. **Tipus de participació:** Conferència invitada.

**Autors:** Grases, F. **Títol:** El IUNICS **Congrés:** V Jornadas de Investigación. 'Investigación Biomédica de Vanguardia.' **Tipus de participació:** Conferència invitada.

**Autors:** Grases, F. **Títol:** Fitato y Dieta: Modulación de los procesos de Calcificación. **Congrés:** V Congreso Nacional de la Federación Estatal de Técnicos Superiores Sanitarios. **Tipus de participació:** Conferència invitada.

**Autors:** Prieto, R.M. **Títol:** Sesión 2, Centro de Investigación Biomédica en Red Fisiopatología de la Obesidad y Nutrición. **Congrés:** Ier Symposium Centro de Investigación Biomédica en Red Fisiopatología de la Obesidad y Nutrición. **Tipus de participació:** Presidència de sessió.

**Autors:** Grases, F.; Costa-Bauza, A.; Perelló, J.; Isern, B.; Sanchis, P.; Prieto, R.M.; Conte, A.; Barragan, F.; Lancina, J.A.; Barbuzano, C.; Arrabal, M.; De Haro, T.; Colom, S.; Riera, J. **Títol:** Urinary lithogenesis risk test. Comparison with the laboratory prototype and multicentric study for validation of the commercial desing. **Congrés:** 5th eULIS Symposium. 12 th European Symposium on Urolithiasis. **Tipus de participació:** Presentació de comunicació i pòster.

**Autors:** Fiol, M.; Prieto, R.M.; Costa-Bauzá, A.; Grases, F. **Títol:** Calcificación cardiovascular en

experimentación animal: efecto del fitato. **Congrés:** I Symposium CIBER, Fisiopatología de la Obesidad y Nutrición. **Tipus de participació:** Presentació comunicació i pòster.

**Autors:** Fiol, M.; Prieto, R.M.; Perelló, J.; García-Valdúeja, M.; Moñino, M.; Grases, F. **Títol:** Dieta mediterránea y excreción urinaria de fitato. **Congrés:** I Symposium CIBER, Fisiopatología de la Obesidad y Nutrición. **Tipus de participació:** Presentació comunicació i pòster.

**Autors:** Grases, F.; Costa-Bauzá, A.; Prieto, R.M.; Sanchis, P.; Isern, B.; Perello, J.; Conte, A.; García-González, R. **Títol:** Cálculos renales papilares: estudio de los efectos de las calcificaciones intrapapilares en su formación. **Congrés:** 19 Reunión Nacional de Litiasis, Endourología y Laparoscopia Urológica. **Tipus de participació:** Presentació comunicació i pòster.

**Autors:** Grases, F.; Prieto, R.M.; Costa-Bauzá, A.; Sanchis, P.; Isern, B.; Perello, J.; Fernández-Palomeque, C.; Conte, A.; García-Raja, A. **Títol:** Mecanismos de desarrollo de calcificaciones cardiovasculares vs mecanismos de formación de cálculos renales. **Congrés:** 19 Reunión Nacional de Litiasis, Endourología y Laparoscopia Urológica. **Tipus de participació:** Presentació comunicació i pòster.

**Autors:** Conte, A.; Grases, F.; Costa-Bauzá, A.; Prieto, R.M.; Montesinos, V.; Ramis, M. **Títol:** Dieta y litiasis renal. **Congrés:** 19 Reunión Nacional de Litiasis, Endourología y Laparoscopia Urológica. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** de Miguel, M.P.; Martín, T.A.; Galán, J.A.; Grases, F.; Costa-Bauzá, A.; de Miguel, R.; Navarro, C. **Títol:** Litiasis vesical en una mujer tardomedieval (Novelda, Alicante) **Congrés:** IX Congreso Nacional de Paleopatología. Investigaciones histórico-médicas sobre salud y enfermedad en el pasado. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Fernández-Palomeque, C.; Grau, A.; Grases, F.; Frontera, G.; García-Raja, A.; Moranta, M.E.; Prieto, R.M.; Bethencourt, A. **Títol:** Inhibición de la calcificación cardiovascular: Papel de los fitatos en la calcificación valvular aórtica. **Congrés:** SEC 2007 - El Congreso de las Enfermedades Cardiovasculares. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Grases, F.; Costa-Bauzá, A.; Isern, B.; Sanchis, P.; Perelló, J.; Conte, A.; Barragán, F.; Lancina, J.A.; Barbuzano, C.; de Haro, T.; Colom, S.; Riera, J. **Títol:** Test de Riesgo Litógeno Urinario. Comparación con el prototipo de laboratorio y estudio multicéntrico para la validación del diseño comercial. **Congrés:** 19 Reunión Nacional de Litiasis, Endourología y Laparoscopia Urológica. **Tipus de participació:** Presentació comunicació.

**Autors:** Grases, F.; Isern, B.; Sanchis, P.; Perello, J.; Costa-Bauzá, A.; Prieto, R.M. **Títol:** A study on factors implied in papillary renal calculi. **Congrés:** 12th European Symposium on Urolithiasis. **Tipus de participació:** Presentació comunicació.

**Autors:** Conte, A.; Grases, F.; Costa-Bauzá, A.; Prieto, R.M.; Montesinos, V.; Ramis, M. **Títol:** Dieta aconsejada en cada tipo de urolitiasis. **Congrés:** VI Congreso Balear de Urología. **Tipus de participació:** Presentació comunicació.

**Autors:** Conte, A.; Grases, F.; Costa-Bauzá, A.; Perelló, J.; Isern, B.; Sanchis, P.; Prieto, R.M.; Barragán, F.; Lancina, J.A.; Barbuzano, C.; Arrabal, M.; de Haro, T.; Colom, S.; Riera, J. **Títol:** Estudio multicéntrico para la validación del prototipo del test de riesgo litógeno urinario (TRLU) y su diseño comercial. **Congrés:** IV Congreso Balear de Urología. **Tipus de participació:** Presentació comunicació.

### Tesis Doctoral

**Autor:** Ángel Arturo López González. **Títol:** Influencia de diferentes factores de riesgo incluyendo el mioinositol hexafosfato cálcico-magnésico en los niveles de densidad mineral ósea en trabajadores de Mallorca. **Directors:** Bartomeu Marí, Antonia Costa-Bauzá.

### Patents

**Autors:** Grases, F.; Sanchis, P.; Costa-Bauzá, A.; Perelló, J.; Prieto, R.M.; Isern, B.; García-González, R. **Títol:** 'Use of phytate as agent inhibiting dissolution of crystals of calcium salts for the prevention of osteoporosis.' **Organismes:** Universitat de les Illes Balears. **Número de registre:** 2007138147

**Autors:** Grases, F.; Perelló, J.; Isern, B.; Sanchis, P.; Prieto, R.M.; Costa-Bauzá, A. **Títol:** 'Fixed-dose association of phytate and zinc.' **Organismes:** Universitat de les Illes Balears. **Número de registre:** 2007093611

**Autors:** Grases, F.; Perelló J.; Isern B.; Sanchis, P.; Prieto, R.M.; Costa-Bauzá, A. **Títol:** 'Asociación a dosis fija de fitato y zinc.' **Organismes:** Universitat de les Illes Balears. **Número de registre:** PCT/051413

**Autors:** Grases, F.; Sanchis, P.; Costa-Bauzá, A.; Perelló J.; Prieto, R.M.; Isern B.; García-González, R. **Títol:** 'Utilización de fitato como agente inhibidor de la disolución de cristales de sales cálcicas para la prevención o tratamiento de la osteoporosis.' **Organismes:** Universitat de les Illes Balears. **Número de registre:** PCT/070102

### Projectes

- Referència: CTQ2006-05640. Estudio de los mecanismos de calcificación de los tejidos blandos. Cálculos renales papilares. Calcificaciones cardiovasculares. Felicià Grases Freixedas.
- Referència: PRDIB-2005GC4-06. Suport al Grup de Recerca en Litiasi Renal com a grup d'excel·lència coherent. Felicià Grases Freixedas.
- Referència: PROGECIC-1C. Envelliment saludable: Factors implicats en la millora de la qualitat de vida. Felicià Grases Freixedas.
- Referència: Referencia Convenio 1458. Estudios sobre la prevención del desarrollo de calcificaciones cardiovasculares en pacientes dializados. Evaluación comparativa de los efectos del fitato (myo-inositol hexafosfato), etidronato, alendronato. Fèlix Grases.

## Química analítica, automatització i medi ambient

### Línies de recerca:

Química analítica  
Automatització  
Medi ambient

### Equip investigador:

#### Investigador principal

Dr. Víctor Cerda Martín (Catedràtic d'Universitat)

#### Membres

Dr. Josep Manuel Estela Ripoll (Titular d'Universitat)  
Dr. Rafael A. Forteza Coll (Titular d'Universitat)  
Dr. Manuel Miro Lladó (Titular d'Universitat)  
Dra. Laura Daniela Ferrer Trovato (Personal Tècnic)  
Dr. Jesus Mario Alpizar Lorenzo (Personal tècnic)  
Sr. Fernando Maya Alejandro (Becari de Col·laboració UIB)  
Sr. Antonio Miguel Serra Hernández (Investigador Contractat FPI-FPU)  
Sra. Irene Llinares Baixauli (Personal Tècnic)  
Sra. Mailen Fernández Rodríguez (Becària de Col·laboració UIB)  
Sra. Maria Del Carmen Pons Bonafe (Personal tècnic)  
Sra. Francisca Bauzá De Mirabo  
Sr. Burkhard Horstkotte (Becari Govern Balear)  
Sr. Matias Manera  
Sra. Maria Emilia Rosende Mustillo (Becària de Col·laboració UIB)

#### Col·laboradors

Sra. Amalia Cerda Lacaci (Professora Associada)  
Sr. Miquel Coll Crespi (Personal Tècnic)

### Publicacions en llibres

**Autors:** Cerdà, J.L.; Cerdà, V. **Títol:** 'Métodos de optimización'. **Clau:** Capítol de llibre.

**Autors :** Blanco, M. ; Cerdà, V. **Títol:** 'Temas avanzados de Quimiometría'. **Editorial:** Col·lecció materials didàctics. Universitat de les Illes Balears. **Clau:** Editors.

**Autors:** Cerdà, V.; Estela, J.M. **Títol:** 'Injection techniques in flow analysis.' **Clau:** Capítol de llibre en premsa.

**Autors:** Cerdà, V.; Estela, J.M. **Títol:** 'On-line sample pretreatment: dissolution and digestion.' **Clau:** Capítol de llibre en premsa.

### Publicacions en revistes internacionals

**Autors:** Manera, M.; Miró, M.; Estela J.M.; Cerdà, V. **Títol:** 'Multi-syringe flow injection solid-phase extraction system for on-line simultaneous spectrophotometric determination of nitro-substituted phenol isomers.' **Revista:** Analytica Chimica Acta. **Volum:** 582 **Pàgina inicial:** 41 **Pàgina final:** 49 **Clau:** Article.

**Autors:** Magalhães, L.M.; Segundo, M.A.; Reis, S.; Lima, J.L.F.C.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** 'Automatic In Vitro Determination of Hypochlorous Acid Scavenging Capacity Exploiting Multisyringe Flow Injection Analysis and Chemiluminescence.' **Revista:** Analytical Chemistry. **Volum:** 79 **Pàgina inicial:** 3933 **Pàgina final:** 3939 **Clau:** Article.

**Autors:** Ferrer, L.; Miró, M.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** 'Analytical methodologies for reliable sulfide determinations in aqueous matrices exploiting flow-based approaches.' **Revista:** Trac-Trends in Analytical Chemistry. **Volum:** 26 **Pàgina inicial:** 413 **Pàgina final:** 422 **Clau:** Article.

**Autors:** Harald Hansen, E.; Miró, M. **Títol:** 'How Flow Injection Analysis (FIA) over the past 25 years has changed our way of performing chemical analyses.' **Revista:** Trac-Trends in Analytical Chemistry. **Volum:** 26 **Pàgina inicial:** 18 **Pàgina final:** 26 **Clau:** Article.

**Autors:** Buanuam, J.; Miró, M.; Harald Hansen, E.; Shiowatana, J.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** 'Multicomponent Sequential Injection Determination of Phenols in Waters by On-Line Extraction and Preconcentration.' **Revista:** Talanta. **Volum:** 71 **Pàgina inicial:** 1710 **Pàgina final:** 1719 **Clau:** Article.

**Autors:** Miró, M.; Harald Hansen, E. **Títol:** 'Miniaturization of environmental chemical assays in flowing systems: The Lab-on-a-Valve approach vis-a-vis Lab-on-a-Chip microfluidic devices.' **Revista:** Analytica Chimica Acta. **Volum:** 600 **Pàgina inicial:** 46 **Pàgina final:** 57 **Clau:** Article.

**Autors:** Manera, M.; Miró, M.; Estela, J.M.; Cerdà, V.; Segundo, M.; Costa Lima, J.L. **Títol:** 'Flow-through solid-phase reflectrometric method for simultaneous multiresidue determination of nitrophenol derivatives.' **Revista:** Analytica Chimica Acta. **Volum:** 600 **Pàgina inicial:** 155 **Pàgina final:** 163 **Clau:** Article.

**Autors:** Fajardo, Y.; Gómez, E.; Garcias, F.; Cerdà, V.; Casas, M. **Títol:** 'Development of an MSFIAMPFS pre-treatment method for radium determination in water samples'. **Revista:** Talanta. **Volum:** 1172 **Pàgina inicial:** **Pàgina final:** 1179 **Clau:** Article.

**Autors:** González-San Miguel, H.M.; Alpízar, J.; Cerdà-Martín, V. **Títol:** 'Development of a new high performance low pressure chromatographic system using a multisyringe burette coupled to a chromatographic monolithic column.' **Revista:** Talanta. **Volum:** 72 **Pàgina inicial:** 296 **Pàgina final:** 300 **Clau:** Article.

**Autors:** Horstkotte, B.; Werner, E.; Seresht, A.K.; Cornelissen, G.; Elsholz, O.; Cerdà, V.; Luttmann, R. **Títol:** 'Sequential injection analyzer for glycerol monitoring in yeast cultivation medium.' **Revista:** Talanta. **Volum:** 71 **Pàgina inicial:** 941 **Pàgina final:** 947 **Clau:** Article.

**Autors:** Buanuam, J.; Miró, M.; Harald Hansen, E.; Shiowatana, J.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** 'Flowthrough microcolumn extraction hyphenated with multisyringe flow injection analysis for automated fractionation and on-line determination of orthophosphate in environmental solids.' **Revista:** Talanta. **Volum:** 71 **Pàgina inicial:** 1710 **Pàgina final:** 1719 **Clau:** Article.

**Autors:** González-San, Miguel, H.M.; Alpízar-Lorenzo, J.M.; Cerdà-Martín, V. **Títol:** 'Simultaneous determination of  $\beta$ -lactamic antibiotics by a new high performance low pressure chromatographic system using a multisyringe burette coupled to a monolithic column (MSC).' **Revista:** Analytical and Bioanalytical Chemistry. **Volum:** 387 **Pàgina inicial:** 663 **Pàgina final:** 671 **Clau:** Article.

**Autors:** Horstkotte, B.; Elsholz, O.; Cerdà, V. **Títol:** 'Development of a capillary electrophoresis system coupled to sequential injection analysis and evaluation by the analysis of nitrophenols' **Revista:** International Journal of Environmental Analytical Chemistry. **Volum:** 87 **Pàgina inicial:** 797 **Pàgina final:** 811 **Clau:** Article.

**Autors:** Pons, C.; Santos, J.L.M.; Lima, J.L.F.C.; Forteza, R.; Cerdà, V. **Títol:** 'Multi-pumping flow system for the determination of nitrite and nitrate in water samples.' **Revista:** Microchimica Acta. **Clau:** Article. **Autors:** Cerdà, V.; Forteza, R.; Estela, J.M. **Títol:** 'Potential of multisyringe flow-based multicommutated systems.' **Revista:** Analytica Chimica Acta. **Volum:** 600 **Pàgina inicial:** 35 **Pàgina final:** 45 **Clau:** Article.

**Autors:** Fajardo, Y.; Ferrer, L.; Garcías, F.; Casas, M.; Cerdà, V. **Títol:** 'Development of a new MSFIAMPFS method for Americium and Plutonium separation and preconcentration.' **Revista:** Analytical Chemistry. **Volum:** 79 **Pàgina inicial:** 3933 **Pàgina final:** 3939 **Clau:** Article.

**Autors:** Alpízar-Lorenzo, J.M.; González-San Miguel, H.M.; Cerdà, V. **Títol:** 'A multisyringe flow injection analysis (MSFIA) system with amperometric and anodic stripping voltamperometric detection for Tl(I), Pb(II), In(III) and Cd(II) determination.' **Revista:** Analytical Chemistry. **Volum:** 79 **Pàgina inicial:** 3933 **Pàgina final:** 3939 **Clau:** Article.

**Autors:** Mesquita, R. B.R.; Noronha, M. L.F.O.B.; Pereira, A.I.L.; Santos, A.C.F.; Torres, A.F.; Cerdà, V.; Rangel, A.O.S.S. **Títol:** Use of tetramethylbenzidine for the spectrophotometric sequential injection determination of free chlorine in waters **Revista:** Talanta **Volum:** 72 **Pàgina inicial:** 1186 **Pàgina final:** 1191 **Clau:** Article.

**Autors:** Gómez, V.; Miró, M.; Callao, M.P.; Cerdà, V. **Títol:** Coupling of sequential injection chromatography with multivariate curve resolution-alternating least squares for enhancement of resolution efficiency. **Revista:** Anal Chem. **Volum:** 79 **Pàgina inicial:** 7767 **Pàgina final:** 7774 **Clau:** Article.

**Autors:** Magalhaes, L.M.; Segundo, M.A.; Reis, S.; Lima, J.L.F.C.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** Multisyringe flow system for determination of hypochlorous acid scavenging activity with chemiluminescence detection. **Revista:** Luminiscence. **Volum:** 20 **Pàgina inicial:** 370 **Pàgina final:** 371 **Clau:** Article.

**Autors:** Maya, F.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** 'Improvement of flow chemiluminescence analysis of sulphide in environmental complex samples using a new automatic multisyringe flow injection analysis system coupled to a gas diffusion unit (CL-MSFIA-GDU)' **Revista:** Analytica Chimica Acta. **Volum:** 601 **Pàgina inicial:** 87 **Pàgina final:** 94 **Clau:** Article.

**Autors:** Serra, A.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** 'Smart MSFIA-system with atomic fluorescence detection for mercury determination using cold vapour technique.' **Revista:** Analytica Chimica Acta. **Clau:** Article en premsa.

**Autors:** Obando, M.A.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** 'Simultaneous determination of hydrochlorothiazide and losartan potassium in tablets by a high performance low pressure chromatographic system using a multi-syringe burette coupled to a monolithic column (MSC) Analytical and Bioanalytical Chemistry, ENV' **Revista:** Analytical and Bioanalytical Chemistry. **Clau:** Article en premsa.

**Autors:** Maya, F.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** 'Simple and fast spectrophotometric determination of chloride in waters using a multisyringe flow injection system.' **Revista:** Talanta. **Clau:** Article en premsa.

**Autors:** Buanuam, J.; Miró, M.; Harald Hansen, E.; Shiowatana, J.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** 'A multisyringe flow trough extraction system for on line monitoring of orthophosphate in soils and sediments.' **Revista:** Talanta. **Clau:** Article en premsa.

**Autors:** Cerdà, V.; Forteza, R.; Estela, J.M. **Títol:** 'Potential of multisyringe flow based multicommutated systems.' **Revista:** Analytica Chimica Acta. **Clau:** Article en premsa.

**Autors:** Maya, F.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** 'Spectrophotometric determination of chloride in waters using a multisyringe flow injection system.' **Revista:** Talanta. **Volum:** 74 **Pàgina inicial:** 1534 **Pàgina final:** 1538 **Clau:** Article en premsa.

**Autors:** Maya, F.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** 'Improving the chemiluminescence-based determination of sulphide in complex environmental samples by using a new automated multi-syringe flow injection analysis system coupled to a gas unit.' **Revista:** Analytica Chimica Acta. **Clau:** Article en premsa.

### Contribucions a Congressos

**Autors:** Cerdà, V. **Títol:** AUTOANALYSIS. Software opportunities for control of flow systems and advanced data evaluation. **Congrés:** 14th International Conference on Flow Injection Analysis. **Tipus de participació:** Conferència invitada.

**Autors:** Miró, M. **Títol:** Novel Strategies for Ion Analysis using Flow-through Methodology. **Congrés:** 4th Conference on Ion Analysis. **Tipus de participació:** Conferència invitada.

**Autors:** Miró, M. **Títol:** On-line sample processing methods exploiting the various generations of flow analysis. **Congrés:** PERCH-CIC Congress V (Center for Innovation in Chemistry: Postgraduate Education and Research Program in Chemistry) in Thailand. **Tipus de participació:** Conferència invitada.

**Autors:** Gómez, V.; Miró, M.; Cerdà, V.; Callao, M.P. **Títol:** Sequential injection chromatography coupled to multivariate curve resolution with alternating least squares for the determination of phenolic compounds. **Congrés:** International symposium on analytical methodology in the environmental field. (IX ISAMEF) **Tipus de participació:** Conferència invitada.

**Autors:** Miró, M.; Cerdà, V. **Títol:** Automated and miniaturized flow-based approaches for the determination of trace levels of environmental pollutants. **Congrés:** IX International symposium on analytical methodology in the environmental field. (IX ISAMEF) **Tipus de participació:** Conferència invitada.

**Autors:** Horstkotte, B.; Elsholz, O.; Cerdà Martín, V. **Títol:** Multisyringe Flow Injection for Fully Automation of Analyte Pre-concentration and Separation by Capillary Electrophoresis. Application for the Analysis of Nitrophenols in Water Samples. **Congrés:** ICFIA Berlín **Tipus de participació:** Comunicació oral.

**Autors:** Serra, A.M.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** Smart MSFIA-system with atomic fluorescence detection for mercury determination using cold vapour technique. **Congrés:** IX International Symposium on analytical methodology in the environmental field (ISAMEF) **Tipus de participació:** Membre del comitè organitzador.

**Autors:** Buanuan, J.; Miró, M.; Cerdà, V.; Harald Hansen, E.; Shioatana, J. **Títol:** A multisyringe flow injection system for automatic fractionation and on-line detection of orthophosphate in solids. **Congrés:** PERCH-CIC Congress V (Center for Innovation in Chemistry: Postgraduate Education and Research Program in Chemistry) in Thailand. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Serra, A.M.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** A smart MSFIA system for mercury determination by means of atomic fluorescence spectrometry. **Congrés:** 14 International conference on flow injection analysis 2007 **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Horstkotte, B.; Arnau Jiménez, C.; Valero, F.; Elsholz, O.; Cerdà, V. **Títol:** Monitoring using sequential injection analysis and AutoAnalysis software: Application for sorbitol in a yeast cultivation **Congrés:** XIV Reunión Nacional de la Sociedad Española de Química Analítica. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Magalhães, L.M.; Segundo, M.A.; Reis, S.; Lima, J.L.F.C.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** Automatic In Vitro Determination of Hypochlorous Acid Scavenging Capacity Exploiting Multisyringe Flow Injection Analysis and Chemiluminescence. **Congrés:** XIV Reunión Nacional de la Sociedad Española de Química Analítica. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Alpízar-Lorenzo, J.M.; González-San Miguel, H.M.; Cerdà, V. **Títol:** Sistema de análisis por inyección en flujo multijeringa (MSFIA) con detección amperométrica y voltamperométrica de redisolución anódica para la determinación de Tl(I), Pb(II), In(III) y Cd(II). **Congrés:** XIV Reunión Nacional de la Sociedad Española de Química Analítica. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Rosende, M.; Miró, M.; Cerdà, V. **Títol:** Comparison of a static and dynamic leaching method based on DIN 38414-S4 Norm for investigation of availability of trace elements from bottom ash. **Congrés:** IX International symposium on analytical methodology in the environmental field. (IX ISAMEF) **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Ayala, C.D.; Castellanos, L.; Brunetto, M.R.; Cerdà, V.; Galignani, M. **Títol:** The determination of phosphate by means of fourier transform infrared spectrometry. **Congrés:** IX International symposium on analytical methodology in the environmental field. (IX ISAMEF) **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Pons, C.; Forteza, R.; Cerdà, V. **Títol:** Multicommutated flow systems for the determination of iron in seawater samples. **Congrés:** IX International symposium on analytical methodology in the environmental field. (IX ISAMEF) **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Serra, A.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** Smart MSFIA-system with atomic fluorescence detection for mercury determination using cold vapour technique. **Congrés:** IX International symposium on analytical methodology in the environmental field. (IX ISAMEF) **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Maya, F.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** Simple and fast spectrophotometric determination of chloride in waters using a multisyringe flow injection system. **Congrés:** IX International symposium on analytical methodology in the environmental field. (IX ISAMEF) **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Maya, F.; Estela, J.M.; Cerdà, V. **Títol:** Improvement of flow chemiluminescence analysis of sulphide in complex environmental samples using a new automatic multisyringe flow injection analysis system coupled to a gas diffusion unit. **Congrés:** IX International symposium on analytical methodology in the environmental field. (IX ISAMEF) **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Horstkotte, B.; Ornelas Soto, N.E.; March, J.; López de Alba, P.L.; Cerdà Martín, V. **Títol:** Multisyringe Flow Injection Analysis for the Hypochlorite Determination in Untreated Cleaning Agents applying Green Methodology. **Congrés:** IX International symposium on analytical methodology in the environmental field. (IX ISAMEF) **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Horstkotte, B.; Elsholz, O.; Cerdà Martín, V. **Títol:** Multisyringe Flow Injection for Fully Automation of Analyte Pre-concentration and Separation by Capillary Electrophoresis. Application for the Analysis of Nitrophenols in Waste Water Samples. **Congrés:** IX International symposium on analytical methodology in the environmental field. (IX ISAMEF) **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Miró, M.; Cerdà, V.; Hansen, E. **Títol:** Potential of the miniaturised Lab-on-a-Valve approach for on-line sample preparation in the environmental analytical field. **Congrés:** Euroanalysis XIV **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Suárez, Y.; Pons, C.; Cerdà, V. **Títol:** Desarrollo de un sistema de inyección en flujo multijeringa (MSFIA) para la determinación de Fe(III) y su preconcentración empleando quitosana cubana. **Congrés:** III Symposio Internacional de Química SIQ '07. Santa Clara. Cuba. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Ferrer, L.; Fajardo, Y.; Gómez, E.; Garcias, F.; Casas, M.; Cerdà, V. **Títol:** Flow systems for automatic separation and pre-concentration of radioactive isotopes in environmental samples. **Congrés:** 14th International conference on flow injection analysis. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Pons, C.; Forteza, R.; Cerdà, V. **Títol:** Multicommutated flow systems for the determination of iron in seawater samples. **Congrés:** IX International Symposium on Analytical Methodology in the Environmental field. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Leal, L.O.; Forteza, R.; Cerdà, V. **Títol:** Multisyringe flow injection analysis: an alternative approach to develop analytical methods for trace elements: As, Se, Sb and Hg. **Congrés:** IX International Symposium on Analytical Methodology in the Environmental field. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Pons, C.; Santos, J.L.M.; Lima, J.L.F.C.; Forteza, R.; Cerda, V. **Títol:** Multi-pumping flow system for the determination of nitrite and nitrate. **Congrés:** IX International Symposium on Analytical Methodology in the Environmental field. **Tipus de participació:** Pòster.

### Organització de congressos

**Congrés:** XIV Reunión Nacional de la Sociedad Española de Química Analítica. **Chairman:** J.M.Estela.

**Congrés:** IX International symposium on analytical methodology in the environmental field. (IX ISAMEF). **Chairman:** V.Cerdà.

### Tesis, tesines i treballs d'investigació

**Autor:** Ferrer Laura D. **Títol:** 'Desarrollo de métodos automáticos de análisis por inyección en flujo multijeringa (MSFIA) para la determinación del ion sulfuro en aguas.' **Director:** Dr. Víctor Cerdà i Dr. José Manuel Estela. **Clau:** Tesi Doctoral.

**Autor:** María del Carmen Pons Bonafé. **Títol:** 'Nuevas metodologías en flujo para la determinación y especiación de hierro, fósforo y nitrógeno.' **Director:** Dr. Víctor Cerdà i Dr. Rafael Cortez. **Clau:** Tesi Doctoral.

**Autor:** Matías Manera. **Títol:** 'Aplicaciones de interés medioambiental, clínico e industrial del análisis por inyección en flujo multiconmutado' **Director:** Dr. Víctor Cerdà i Dr. José Manuel Estela. **Clau:** Tesi Doctoral.

**Autor:** Elena Savoniva. **Títol:** 'Development of new flow-through extraction methods for fractionation of trace elements in environmental solids.' **Director:** Petr Fedotov, Rainer Wennrich i Manuel Miró. **Clau:** Tesi Doctoral.

**Autor:** Janya Buanuam. **Títol:** 'Development and Application of Dynamic Extraction Systems with Hyphenated Techniques for Assessment of Elemental Fractionation in Solid Substrates.' **Director:** Juwadee Shiwatana, Elo Hansen, Manuel Miró. **Clau:** Tesi Doctoral.

### Projectes

- Referència: CTQ2004-03256/BQU. Desarrollo de sistemas automáticos inteligentes para la determinación de parámetros de interés ambiental. José Manuel Estela.

- Referència: CTQ2004-01201/BQU. Desarrollo de métodos automáticos en flujo para la monitorización y control de biorreactores y depuradoras de aguas residuales. Víctor Cerdà Martín.
- Referència: CTQ2007-64331 Desarrollo de métodos automáticos de análisis. Aplicación a planes de vigilancia ambiental. Víctor Cerdà Martín.
- Referència: PROGECIC-5C Diseño y aplicación de sistemas de análisis para la cuantificación de elementos traza en el océano. Víctor Cerdà Martín.
- Referència: Desarrollo de una nueva metodología analítica automática para la determinación de contaminantes prioritarios en los residuos sólidos resultantes del proceso de incineración. Manuel Miró.
- Referència: HF2006-0163. Proyecto ARSELIO: Desarrollo de sondas fluorescentes para la determinación de arsénico y selenio. Víctor Cerdà Martín.
- Referència: PCTIB2005GC3-07. Grupos competitivos del Gobierno Balear. Víctor Cerdà Martín.
- Referència: CONTRACTE RAMON Y CAJAL: 'Desarrollo de métodos analíticos automáticos basados en una nueva técnica de extracción con fase sólida renovable para la determinación de niveles traza de contaminantes prioritarios (metales, metaloides, pesticidas, compuestos fenólicos y radioisótopos) en muestras ambientales, biológicas, industriales y productos de alimentación'. Manuel Miró.

### Convenis i contractes

- Tirme. Participació dins el Pla de Vigilància.
- MAC Insular. Encàrrec del Pla de Vigilància.
- Crison Instruments. Conveni de col·laboració.
- Sciware. Conveni de col·laboració.

## Química bioinorgànica i biorgànica

### Línies de recerca:

Complexos de metalls de transició amb molècules que presenten activitat biològica i/o farmacològica

### Equip investigador:

#### Investigador principal

Dr. Angel Terrón Homar (Titular d'Universitat)

#### Membres

Dr. Joan Jesus Fiol Arbos (Titular d'Universitat)  
Dr. Ángel García Raso (Titular d'Universitat)  
Dr. Bartomeu Adrover Fiol (Professor Associat)  
Dr. Luis Angel Herrero Aisa (Professor Associat)  
Sr. Miguel Barceló Oliver (Investigador Contractat FPI-FPU)  
Sra. Francisca M<sup>a</sup> Alberti Aguiló (Personal Tècnic)  
Sr. Ferràn Bádenas Jovani  
Sr. Andrés Tasada Lozano

### Publicacions en revistes internacionals

**Autors:** García-Raso, A.; Albertí, F.; Fiol, J.; Tasada, A.; Barceló-Oliver, M.; Molins, E.; Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P. **Títol:** 'A combined experimental and theoretical study of anion- $\pi$  interactions in bis (pyrimidine) salts.' **Revista:** European Journal of Organic Chemistry. **Volum:** 2007 **Pàgina inicial:** 5821 **Pàgina final:** 5825 **Clau:** Article.

**Autors:** García-Raso, A.; Albertí, F.; Fiol, J.; Tasada, A.; Barceló-Oliver, M.; Molins, E.; Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P. **Títol:** 'Anion- $\pi$  interactions in bisadenine derivatives: a combined crystallographic and theoretical study.' **Revista:** Inorganic Chemistry. **Volum:** 46 **Pàgina inicial:** 10724 **Pàgina final:** 10735 **Clau:** Article.

**Autors:** Barceló-Oliver, M.; García-Raso, A.; Terrón, A.; Molins, E.; Prieto, M.J.; Moreno, V.; Martínez, J.; Lladó, V.; López, I.; Gutiérrez, A.; Escribá, P.V. **Títol:** 'Synthesis and Mass Spectroscopy Kinetics of a Novel Ternary Copper(II) Complex with Cytotoxic Activity Against Cancer Cells.' **Revista:** Journal of Inorganic Biochemistry. **Volum:** 101 **Pàgina inicial:** 649 **Pàgina final:** 659 **Clau:** Article.

**Autors:** Barceló-Oliver, M.; Terrón, A.; García-Raso, A.; Molins, E. **Títol:** 'Models for Thyroxine: Aromatic Iodine-Assisted Self-Assemblies.' **Revista:** Polyhedron. **Volum:** 26 **Pàgina inicial:** 1417 **Pàgina final:** 1426 **Clau:** Article.

**Autors:** García-Raso, A.; Fiol, J.J.; Tasada, A.; Albertí, F.M.; Bádenas, F.; Solans, X.; Font-Bardía, M. **Títol:** 'N-9,N-9'-polymethylene-bisadenine complexes with d(10) metal ions.' **Revista:** Polyhedron. **Volum:** 26 **Pàgina inicial:** 949 **Pàgina final:** 957 **Clau:** Article.

**Autors:** Terrón, A.; Fiol, J.J.; García-Raso, A.; Barceló-Oliver, M.; Moreno, V. **Títol:** 'Biological recognition patterns implicated by the formation and stability of ternary metal ion complexes of low-molecular-weight formed with amino acid/peptides and nucleobases/nucleosides.' **Revista:** Coordination Chemistry Reviews. **Volum:** 251 **Pàgina inicial:** 1973 **Pàgina final:** 1986 **Clau:** Review.

### Contribucions a Congressos

**Autors:** Barceló-Oliver, M.; García-Raso, A.; Terrón, A.; Molins, E.; Prieto, M.J.; Moreno, V.; Martínez, J.; Gutiérrez, A.; Lladó, V.; López, I.; Escribá, P.V. **Títol:** Can copper complexes present anticancer activity? **Congrés:** ICBIC XIII: 13th International Conference on Biological Inorganic Chemistry (July 15-20). **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Barceló-Oliver, M.; Soberats, B.; Terrón, A.; García-Raso, A.; Bádenas, F.; Lah, N.; Turel, I.; Morell, M.; Molins, E. **Títol:** New approaches to Zn(II) detection. **Congrés:** ICBIC XIII: 13th International Conference on Biological Inorganic Chemistry (July 15-20). **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Barceló-Oliver, M.; Soberats, B.; Terrón, A.; García-Raso, A.; Bádenas, F.; Lah, N.; Turel, I.; Morell, M. **Títol:** New approaches of Zn(II) detection. **Congrés:** 14th International Conference on Biological Inorganic Chemistry. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Barceló-Oliver, M.; García-Raso, A.; Terrón, A.; Bádenas, F.; Molins, E.; Prieto, M.J.; Moreno, V.; Martínez, J.; Gutiérrez, A.; Lladó, V.; López, I.; Escribá, P. **Títol:** Can copper complexes present anticancer activity? **Congrés:** 14th International Conference on Biological Inorganic Chemistry. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Fiol, J.J.; García-Raso, A.; Terrón, A.; Tasada, A.; Albertí, F.M.; Barceló-Oliver, M.; Aguiló, J.; Torres, M.; López-Zafra, A.; Moreno, V.; Prieto, M.J.; Molins, E. **Títol:** Estudio de complejos de rutenio e iridio con adeninas modificadas y otros heterociclos de interés biológico. **Congrés:** Reunión Científica de Bioinorgánica 2007 (Compostela, 16-19 septiembre) **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Terrón, A.; Herreo, L.A.; Barceló-Oliver, M. **Títol:** Estudio calorimétrico y potenciométrico de la interacción en disolución entre iones divalentes y nicotinamida adenín dinucleótido. **Congrés:** Reunión Científica de Bioinorgánica 2007 (Compostela, 16-19 septiembre) **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Sibole, J.V.; Cabot, C.; Quetglas, K.; García-Raso, A.; Fiol, J.J.; Albertí, F.M.; Tasada, A. **Títol:** Síntesis, caracterización y bioensayos con adeninas N6-sustituidas y sus complejos con Cu(II) **Congrés:** Reunión Científica BIOINORGÁNICA 2007 **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Barceló-Oliver, M.; Terrón, A.; Fiol, J.J.; García-Raso, A.; Moreno, V. **Títol:** Patrones de reconocimiento implicados en la formación y estabilización de complejos metálicos ternarios formados con aminoácidos/péptidos y nucleobases/nucleósidos. **Congrés:** Reunión científica de Bioinorgánica 2007 **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** García-Raso, A.; Fiol, J.J.; Albertí, F.M.; Tasada, A.; Huertas, F.; Barceló-Oliver, M.; Molins, E.; Ros, T.; Martínez, J.; Gutiérrez, A.; Besalduch, J.; Navarro, M. **Títol:** Estructuras discretas, diméricas o poliméricas en las interacciones de bis-purinas y pirimidinas con iones metálicos de transición. **Congrés:** Reunión Científica de Bioinorgánica. Santiago de Compostela (Galicia), 16-19 Setembre. **Tipus de participació:** Presentació comunicació.

### Projectes

- Referència: CTQ2006-09339/BQU. Diseño de nuevas moléculas derivadas de purinas y pirimidinas N-sustituidas y estudio de su química de coordinación con iones metálicos: Búsqueda de nuevas estructuras bioactivas. Angel Terrón Homar.

- Referència: Ajut com a Grup Competitiu del Grup de Química Bioorgànica i Bioinorgànica. Àngel Terrón Homar.

## Química inorgànica

### Línies de recerca:

Química de superfícies i catàlisi heterogènia  
Materials nanoestructurats  
Biomaterials

### Equip investigador:

#### Investigador principal

Dr. Carlos Otero Areán (Catedràtic d'Universitat)

#### Membres

Dra. Gemma Isabel Turnes Palomino (Titular d'Universitat)  
Dra. Montserrat Rodríguez Delgado (Professora Ajudant)  
Dr. Paolo Rumori (Professor Associat)

## Publicacions en revistes internacionals

**Autors:** Rodríguez Delgado, M.; Otero Areán, C. **Títol:** 'Thermodynamics of nitrogen adsorption on the zeolite H-FER' **Revista:** Applied Surface Science. **Volum:** 253 **Pàgina inicial:** 5705 **Pàgina final:** 5708 **Clau:** Article.

**Autors:** Otero Areán, C.; Nachtigallová, D.; Nachtigall, P.; Garrone, E.; Rodríguez Delgado, M. **Títol:** 'Thermodynamics of reversible gas adsorption on alkali-metal exchanged zeolites: The interplay of infrared spectroscopy and theoretical calculations.' **Revista:** Physical Chemistry Chemical Physics. **Volum:** 9 **Pàgina inicial:** 1421 **Pàgina final:** 1437 **Clau:** Article.

**Autors:** Manoilova, O.V.; Olindo, R.; Otero Areán, C.; Lercher, J.A. **Títol:** 'Variable temperature FTIR study on the surface acidity of variously treated sulfated zirconias.' **Revista:** Catalysis Communications. **Volum:** 8 **Pàgina inicial:** 865 **Pàgina final:** 870 **Clau:** Article.

**Autors:** Nachtigall, P.; Rodríguez Delgado, M.; Frolich, K.; Bulánek, R.; Turnes Palomino, G.; López Bauçà, C.; Otero Areán, C. **Títol:** 'Periodic density functional and FTIR spectroscopic studies on CO adsorption on the zeolite Na-FER' **Revista:** Microporous and Mesoporous Materials. **Volum:** 106 **Pàgina inicial:** 162 **Pàgina final:** 173 **Clau:** Article.

**Autors:** Balas, F.; Rodríguez Delgado, M.; Otero Areán, C.; Conde, F.; Matesanz, E.; Esquivias, L.; Ramírez-Castellanos, J.; Gonzalez-Calbet, J.; Vallet-Regí, M. **Títol:** 'Structural characterization of nanosized silica spheres.' **Revista:** Solid State Sciences. **Volum:** 9 **Pàgina inicial:** 351 **Pàgina final:** 356 **Clau:** Article.

**Autors:** Otero Areán, C.; Rodríguez Delgado, M.; López Bauçà, C.; Vrbka, L.; Nachtigall, P. **Títol:** 'Carbon monoxide adsorption on low-silica zeolites: From single to dual and to multiple cation sites.' **Revista:** Physical Chemistry Chemical Physics. **Volum:** 9 **Pàgina inicial:** 4657 **Pàgina final:** 4661 **Clau:** Article.

**Autors:** Armandi, M.; Bonelli, B.; Bottero, I.; Otero Areán, C.; Garrone, E. **Títol:** 'Synthesis and characterization of ordered porous carbons with potential applications as hydrogen storage media'. **Revista:** Microporous and Mesoporous Materials. **Volum:** 103 **Pàgina inicial:** 150 **Pàgina final:** 157 **Clau:** Article.

**Autors:** Otero Areán, C.; Turnes Palomino, G.; Llop Carayol, M.R. **Títol:** 'Variable temperature FTIR studies on hydrogen adsorption on the zeolite (Mg,Na)-Y' **Revista:** Applied Surface Science. **Volum:** 253 **Pàgina inicial:** 5701 **Pàgina final:** 5704 **Clau:** Article.

## Contribucions a Congressos

**Autors:** Otero Areán, C. **Títol:** 'Dinitrogen and carbon monoxide hydrogen bonding in protonic zeolites: Studies from variable-temperature infrared spectroscopy'. **Congrés:** XVII International Conference on Horizons in Hydrogen Bond Research. **Tipus de participació:** Conferència plenària.

**Autors:** Bulánek, R.; Otero Areán, C.; Nachtigallová, D.; Frolich, K.; Nachtigall, P. **Títol:** 'Similarities and differences in IR spectra of CO adsorbed on alkali-metal-exchanged zeolites.' **Congrés:** Second International Symposium on Microporous and Mesoporous Materials. **Tipus de participació:** Presentació comunicació.

**Autors:** Manzano, M.; Aina, V.; Otero Areán, C.; Balas, F.; Cauda, V.; Colilla, M.; Rodríguez Delgado, M.; Vallet-Regí, M. **Títol:** 'Liberación de fármacos en MCM-41: influencia de su morfología y funcionalización.' **Congrés:** XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química. **Tipus de participació:** Presentació comunicació.

**Autors:** Armandi, M.; Bonelli, B.; Otero Areán, C.; Garrone, E. **Títol:** 'Role of microporosity in hydrogen adsorption on templated nanoporous carbons.' **Congrés:** International Congress on Hydrogen. **Tipus de participació:** Presentació de comunicació.

**Autors:** Frolich, K.; Bulanek, R.; Nachtigallova, D.; Nachtigall, P.; Otero Areán, C. **Títol:** 'A general model for the vibrational dynamics of carbon monoxide adsorbed on metal-exchanged zeolites.' **Congrés:** 30th Annual Meeting of the British Zeolite Association. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Rodríguez Delgado, M.; Llop Carayol, M.R.; Turnes Palomino, G.; Otero Areán, C. **Títol:** 'Thermodynamics of reversible hydrogen adsorption on the zeolite Mg-X from variable-temperature FTIR spectroscopy'. **Congrés:** 30th Annual Meeting of the British Zeolite Association. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Turnes Palomino, G.; Llop Carayol, M.R.; Otero Areán, C. **Títol:** 'Thermodynamics of hydrogen adsorption on the zeolite CaY' **Congrés:** EUROPACAT VIII **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Armandi, M.; Bonelli, B.; Otero Areán, C.; Garrone, E. **Títol:** 'Synthesis and characterization of ordered porous carbons.' **Congrés:** International Symposium on Zeolites and Microporous Crystals. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Armandi, M.; Bonelli, B.; Karaindrou, E.I.; Otero Areán, C.; Garrone, E. **Títol:** 'Post-synthesis modifications of SBA-15 carbon replicas: Improving hydrogen storage by increasing microporous volume.' **Congrés:** EUROPACAT VIII **Tipus de participació:** Pòster.

### Tesis, tesines i treballs d'investigació

**Autor:** Clàudia López i Bauçà. **Títol:** Caracterització de centres catiónics en zeolites mitjançant espectroscòpia infraroja: CO com a sonda molecular.' **Director:** Carlos Otero Areán y Montserrat Rodríguez Delgado. **Clau:** Memòria de master.

### Projectes

- Referència: MAT2005 05350. Materiales porosos para la detección, adsorción y depósito de gases. Carlos Otero Areán.
- Referència: PROGECIB-22A. Estudio de materiales porosos para facilitar el uso del hidrógeno como combustible. Gemma Turnes Palomino.

### Col·laboracions amb altres institucions

- Col·laboració amb l'Institut de Química Física de la Universitat de Torí (Itàlia).
- Col·laboració amb l'Institut de Física de la Universitat de San Petersburg (Rússia).
- Col·laboració amb el Departament de Ciència dels Materials del Politècnic de Torí (Itàlia).
- Col·laboració amb el CSIC: Institut Nacional del Carbó, Oviedo.
- Col·laboració amb el CNRS: ISMRA, Universitat de Caen (França).
- Col·laboració amb el Departament de Química Inorgànica i Bioinorgànica, Facultat de Farmàcia, Universitat Complutense, Madrid.
- Col·laboració amb el Centre de Recherche sur les Matériaux à Haute Température, CNRS, Orléans (França).
- Col·laboració amb l'Institut de Química Orgànica i Bioquímica de l'Acadèmia de Ciències de Praga (República Txeca).
- Col·laboració amb el Departament de Química Física de la Universitat de Praga (República Txeca).

## Química supramolecular

### Línies de recerca:

- Química supramolecular
- Química computacional i modelització molecular
- Sensors

### Equip investigador:

#### Investigador principal

Dr. Antoni Costa Torres (Catedràtic d'Universitat)

#### Membres

Dr. Pere Maria Deya Serra (Catedràtic d'Universitat)

Dr. Pau Ballester Balaguer (Titular d'Universitat)  
Dr. Jeroni Morey Salva (Titular d'Universitat)  
Dr. Antoni Frontera Beccaria (Professor Contractat Doctor)  
Dra. Maria Del Carmen Rotger Pons (Professora Contractada Doctora)  
Dr. David Quiñonero Santiago (Investigador Contractat)  
Dra. Magdalena Capo Cañellas (Professora Associada)  
Dra. Carolina Garau Rosselló  
Dra. Maria de les Neus Piña Capo  
Sr. Manuel Vega Reynes (Personal Tècnic)  
Sra. Ana Maria Castilla Manjon  
Sr. Bartomeu Soberats Reus

### Publicacions en revistes internacionals

**Autors:** Piña, M.N.; Rotger, M.; Soberats, B.; Ballester, P.; Deyà, P.M.; Costa, A. **Títol:** 'Evidence of anion-induced dimerization of a squaramide-based host in protic solvents.' **Revista:** Chemical Communications. **Pàgina inicial:** 963 **Pàgina final:** 965 **Clau:** Article.

**Autors:** Frontera A.; Quiñonero D.; Costa A.; Ballester P.; Deyà P.M. **Títol:** 'MP2 study of cooperative effects between cation- $\pi$ , anion- $\pi$  and  $\pi$ - $\pi$  interactions.' **Revista:** New Journal of Chemistry. **Volum:** 31 **Pàgina inicial:** 556 **Pàgina final:** 560 **Clau:** Article.

**Autors:** Garau, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Escudero, D.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà P.M. **Títol:** 'MP2 Study of Anion- $\pi$  Complexes of Trifluoro-s-triazine with Tetrahedral and Octahedral Anions.' **Revista:** Chemical Physics Letters. **Volum:** 438 **Pàgina inicial:** 104 **Pàgina final:** 108 **Clau:** Article. **Autors:** Alkorta, I.; Quiñonero, D.; Garau, C.; Frontera, A.; Elguero, J.; Deyà, P.M. **Títol:** 'Dual Cation and Anion Acceptor Molecules. The case of  $(\eta^6\text{-C}_6\text{H}_6)(\eta^6\text{-C}_6\text{F}_6)\text{Cr}(0)$  Complex.' **Revista:** Journal of Physical Chemistry A **Volum:** 111 **Pàgina inicial:** 3137 **Pàgina final:** 3142 **Clau:** Article.

**Autors:** García-Raso, A.; Albertí, F.; Fiol, J.; Tasada, A.; Barceló-Oliver, M.; Molins, E.; Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P. **Títol:** 'A combined experimental and theoretical study of anion- $\pi$  interactions in bis(pyrimidine) salts.' **Revista:** European Journal of Organic Chemistry. **Volum:** 2007 **Pàgina inicial:** 5821 **Pàgina final:** 5825 **Clau:** Article.

**Autors:** García-Raso, A.; Albertí, F.; Fiol, J.; Tasada, A.; Barceló-Oliver, M.; Molins, E.; Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P. **Títol:** 'Anion- $\pi$  interactions in bisadenine derivatives: a combined crystallographic and theoretical study.' **Revista:** Inorganic Chemistry. **Volum:** 46 **Pàgina inicial:** 10724 **Pàgina final:** 10735 **Clau:** Article.

**Autors:** Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Costa, A.; Ballester, P.; Deyà, P.M. **Títol:** 'Induced- Polarization Energy Map: A Helpful Tool for Predicting Geometric Features of Anion- $\pi$ . Complexes in Seven-Membered Rings.' **Revista:** Journal Of Chemical Theory And Computation. **Volum:** 3 **Pàgina inicial:** 2098 **Pàgina final:** 2107 **Clau:** Article.

**Autors:** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Escudero, D.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P.M. **Títol:** 'A Theoretical Study of Anion- $\pi$  Interactions in Seven-Membered Rings.' **Revista:** Chemphyschem. **Volum:** 8 **Pàgina inicial:** 1182 **Pàgina final:** 1187 **Clau:** Article.

### Contribucions a Congressos

**Autors:** Rotger, C.; Costa, A.; Vega, M. **Títol:** Formation of nanoespheres from self-assembled oligosquaramides. **Congrés:** Trends in nanotechnology (TNT2007) **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Soberats, B.; Rotger, C.; Deyà, P.M.; Costa, A. **Títol:** Alquinil escuaramidas tripodales: Síntesis y evaluación como ligandos. **Congrés:** XXXI Reunión bienal de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ) **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. **Títol:** Mapas de Energía de Polarización Inducida (IPE): Una Nueva Herramienta para Predecir Geometrías de Complejos Anión- $\pi$  **Congrés:** XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M. **Títol:** Estudio Teórico de Sinergias en Enlaces de Hidrógeno no Convencionales en Complejos con Sistemas Aromáticos. **Congrés:** XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química. **Tipus de participació:** Presentació comunicació.

## Projectes

- Referència: PROGECIB-15A. Preparación e identificación de nuevos agentes terapéuticos de base escuaramida en modelos de membrana celular mediante un ensayo colorimétrico. Maria del Carmen Rotger Pons.
- Referència: CTQ2005-08989-C02-01/BQU. Diseño, Síntesis y Evaluación de Estructuras Supramoleculares Funcionales: Sensores, Receptores y Dispositivos Moleculares. Pere Maria Deya Serra.
- Referència: PCTIB-2005GC3-08. Suport a grups competitiu. Antoni Costa Torres.
- Referència: PROGECIB-33A. Estudio experimental y teórico de unidades básicas viables para la construcción de receptores de aniones tóxicos frecuentemente presentes en el medio ambiente. David Quiñonero Santiago.
- Referència: BQU2002-04651. Diseño y evaluación de estructuras supramoleculares funcionales: sensores, receptores y dispositivos moleculares. Antoni Costa Torres.

## Reactivitat molecular i disseny de fàrmacs

### Línies de recerca:

- Estudi cinètic i termodinàmic de la formació de bases de Schiff de composts del grup de la vitamina B6
- Reactivitat química d'antibiòtics beta i gamma lactàmics
- Aplicació de la química computacional a l'estudi de compostos d'interès biològic

### Equip investigador:

#### Investigador principal

Dr. Francisco Muñoz Izquierdo (Catedràtic d'Universitat)

#### Membres

- Dra. Josefa Donoso Pardo (Catedràtica d'Universitat)
- Dr. Joan Frau Munar (Titular d'Universitat)
- Dr. Bartomeu Vilanova Canet (Titular d'Universitat)
- Dr. Antoni Salva Salva (Professor Associat)
- Sr. Miquel Adrover Estelrich (Professor Ajudant)
- Sr. Joaquin Ortega Castro (Professor Ajudant)

## Publicacions en revistes internacionals

**Autors:** Adrover, M.; Vilanova, B.; Muñoz, F.; Donoso, J. **Títol:** 'Pyridoxamine, A Scavenger Agent of Carbohydrates.' **Revista:** International Journal of Chemical Kinetics. **Volum:** 39 **Pàgina inicial:** 154 **Pàgina final:** 167 **Clau:** Article.

**Autors:** Ortega-Castro, J.; Alfonso-Méndez, L.; Otto, P.; Hernández-Laguna, A. **Títol:** 'Soft Coulomb Hole method applied to molecules.' **Revista:** International Journal of Quantum Chemistry. **Volum:** 107 **Pàgina inicial:** 1046 **Pàgina final:** 1059 **Clau:** Article.

**Autors:** Arribas, E.; Bissanger, H.; Sotos-Lomas, A.; García-Moreno, M.; García-Cánovas, F.; Donoso, J.; Muñoz-Izquierdo, F.; Varón, R. **Títol:** 'A method, based on statistical moments, to evaluate the kinetic parameters involved in instable enzyme systems.' **Revista:** Journal of Mathematical Chemistry. **Pàgina final:** 167 **Clau:** Article en premsa.

**Autors:** Adrover, M.; Vilanova, B.; Muñoz, F.; Donoso, J. **Títol:** 'Kinetic study of the reaction of glycolaldehyde with two glycation targets models: N-Ac-Phe-Lys and N-Ac-Cys.' **Revista:** Annals of the New York Academy of Sciences. **Clau:** Article en premsa.

## Contribucions a Congressos

**Autors:** Adrover, M.; Vilanova, B.; Frau, J.; Ortega J.; Salvà, A.; Muñoz, F.; Donoso, J. **Títol:** Kinetic study of the reaction between Glycolaldehyde and N-acetyl-Cys, and N-acetyl-Phe-Lys. **Congrés:** 9th International Symposium on the Maillard Reaction. **Tipus de participació:** Ponència.

**Autors:** Tomás, D.; Frau, J. **Títol:** La formación en nuevas tecnologías: una necesidad. **Congrés:** II Jornadas Nacionales sobre la Enseñanza de la Química. **Tipus de participació:** Presentació comunicació.

**Autors:** Adrover, M.; Vilanova, B.; Frau, J.; Ortega, J.; Salvà, A.; Muñoz F.; Donoso, J. **Títol:** Pyridoxamine reacts with the carbonyl group of Amadori compounds. **Congrés:** 9th International Symposium on the Maillard reaction. **Tipus de participació:** Presentació comunicació I Pòster.

**Autors:** Adrover, M.; Frau, J.; Vilanova B.; Muñoz F.; Donoso J. **Títol:** Guía docente de la asignatura 'Introducción a la Experimentación en Química Física' adecuada al EEES **Congrés:** II Jornadas Nacionales sobre la Enseñanza de la Química. **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Ortega-Castro, J.; Sainz-Diaz, C.I.; Hernández-Laguna, A. **Títol:** Theoretical high-pressure study of substituted 2:1 dioctahedral phyllosilicates. **Congrés:** EuroClay 2007 **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Ortega-Castro, J.; Sainz-Diaz, C.I.; Hernández-Laguna, A. **Títol:** DFT elastic constants of 2:1 dioctahedral phyllosilicates. **Congrés:** EuroClay 2007 **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Ortega-Castro, J.; Sainz-Diaz, C.I.; Hernández-Laguna, A. **Títol:** Estudio DFT de la influencia de la presión sobre el volumen de la pirofilita. **Congrés:** XXXI Reunión de la Biental de Física. **Tipus de participació:** Pòster.

### Tesis, tesines i treballs d'investigació

**Autor:** Joaquin Ortega Castro. **Títol:** 'Investigación mecano-cuántica del orden/desorden catónico y propiedades elásticas de filosilicatos 2:1 dioctaédricos.' **Director:** Alfonso Hernández Laguna, Claro Ignacio Sainz Díaz. **Clau:** Tesi Doctoral.

### Projectes

- Referència: CGL2005-02681/BTE. "Investigación teórica de la influencia de la substitución isomórfica de cationes sobre los mecanismos de las reacciones de deshidroxilación de silicatos laminares." Alfonso Hernández Laguna.
- Referència: Estudio de los mecanismo de inhibición de la formación de los AGEs asociados a los estados de hiperglucemia. Joan Frau Munar.
- Referència: CTQ2005-00250/BQU. Inhibición selectiva de enzimas que presentan el PLP como cofactor. Francisco Muñoz Izquierdo.

## Activitats realitzades fora dels grups

### Publicacions en llibres

**Autors:** Llobera Balle, A.; Cañellas Mut, J. **Títol:** 'Obtenció d'un producte comercialitzable amb propietats antioxidants a partir del germen de garroff.' **Referència:** Quaderns d'Investigació. 4. Govern de les Illes Balears. Conselleria d'Agricultura i Pesca. **Clau:** Llibre.

### Publicacions en revistes internacionals

**Autors:** Llobera, A.; Cañellas, J. **Títol:** 'Dietary Fibre Content and Antioxidant Activity of Manto Negro Red Grape (Vitis vinifera): Pomace and Stem.' **Revista:** Food Chemistry. **Volum:** 101 **Pàgina inicial:** 659 **Pàgina final:** 666 **Clau:** Article.

**Autors:** Baeza, A.; Sansano, J.M.; Saá, J.M.; Nájera, C. **Títol:** 'Enantioenriched Cyanohydrin-Ophosphates: synthesis and applications as building blocas.' **Revista:** Pure & Applied Chemistry. **Volum:** 79 **Pàgina inicial:** 213 **Pàgina final:** 221 **Clau:** Article.

**Autors:** Tur, F.; Saá, J.M. **Títol:** 'Direct, Catalytic enantioselective nitroaldol (Henry) reaction of trifluoromethyl ketones: an asymmetric entry to  $\alpha$ -trifluoromethyl-substituted quaternary carbons.' **Revista:** Organic Letters. **Volum:** 09 **Pàgina inicial:** 5079 **Pàgina final:** 5082 **Clau:** Article.

### Contribucions a Congressos

**Autors:** Tur, F.; Saá, J.M. **Títol:** Direct, Catalytic enantioselective nitroaldol (Henry) reaction of trifluoromethyl ketones: an asymmetric entry to  $\alpha$ -trifluoromethyl substituted quaternary carbons. **Congrés:** IV Simposio de Investigadores Jóvenes. RSEQ Sigma-Aldrich (4SIJ) **Tipus de participació:** Pòster.

**Autors:** Tur, F.; Saá, J.M. **Títol:** Reacció nitroaldòlica catalítica asimètrica directa de trifluorometil cetones. Una nova entrada a la síntesi asimètrica de carbonis quaternaris  $\alpha$ -CF<sub>3</sub>-substitüits. **Congrés:** V Trobada de Joves Investigadors Catalans.Vic (Espanya) **Tipus de participació:** Comunicació oral.

### Projectes

- Referència: CTQ2004-02375. Lantánidos en Catálisis Enantioselectivas. Jose Manuel Saá Rodríguez.
- Referència: CTQ2007-62952. Sales ato de amonio de complejos lantánidos en catálisis enantioselectivas. Jose Manuel Saá Rodríguez.
- Referència: CTQ2006-26298E. Red CASI. José Manuel Saá Rodríguez.
- Referència: CTQ2007-30911E. 2<sup>a</sup> Jornadas de la Red de Catálisis Asimétrica (Red CASI). José Manuel Saá Rodríguez.
- Referència: CAIB13611/2007. 2<sup>a</sup> Jornadas de la Red de Catálisis Asimétrica (Red CASI). José Manuel Saá Rodríguez.
- Referència: UIB/2007. 2<sup>a</sup> Jornadas de la Red de Catálisis Asimétrica (Red CASI). José Manuel Saá Rodríguez.
- Referencia: CESCO/2007. Ayudas MEC para acceso telemático CESCO. José Manuel Saá Rodríguez.