

List of publications

- Structure and bonding of propyne on Cu(111) from density functional periodic and cluster models, A. Valcárcel, J.M. Ricart, A. Clotet, A. Markovits, C. Minot, F. Illas, J. Chem. Phys. 116 (2002) 1-6.
- Theoretical study of the structure of propene adsorbed on Pt(111), A. Valcárcel, J.M. Ricart, A. Clotet, A. Markovits, C. Minot, F. Illas, Surf. Sci. 519 (2002) 250-258.
- Comparative DFT study of the adsorption of 1,3-butadiene, 1-butene and 2-*cis/trans*-butenes on the Pt(111) and Pd(111) surfaces, A. Valcárcel, A. Clotet, J.M. Ricart, F. Delbecq, P. Sautet, Surf. Sci. 549 (2004) 121-133.
- Theoretical study of propene adsorbed on sulphated Pt(111), A. Valcárcel, A. Gil, A. Clotet, J.M. Ricart, Chem. Phys. Lett. 339(2004) 295-299. .
- Theoretical interpretation of the IR spectrum of propyne on Cu(111), A. Valcárcel, J.M. Ricart, F. Illas, A. Clotet, J. Phys. Chem. B 108 (2004) 18297-18305.
- Comparative theoretical study of the structure and bonding of propyne on the Pt(111) and Pd(111) surfaces, A. Valcárcel, A. Clotet, J.M. Ricart, F. Illas, Chem. Phys. 309 (2005) 33-39.
- Selectivity control for the catalytic 1,3-butadiene hydrogenation on Pt(111) and Pd(111) surfaces: radical versus closed-shell intermediates, A. Valcárcel, A. Clotet, J.M. Ricart, F. Delbecq, P. Sautet, J. Phys. Chem. B, in press.
- Analysis of the reaction intermediates for propylene dehydrogenation on Pt(111), A. Valcárcel, A. Clotet, J.M. Ricart, F. Illas, A. Markovits, C. Minot, in preparation.
- DFT characterization of adsorbed NH_x species on Pt(111) and Pt(100) surfaces, G. Novell-Leruth, A. Valcárcel, A. Clotet, J.M. Ricart, J. Perez-Ramirez, J. Phys. Chem. B, submitted.

Agraïments

Primer de tot, vull agrair a la meva família el seu recolzament incondicional. Gràcies per donar-me ànims constantment, per estar al meu costat en els moments bons i en els no tant bons. Mai us podré agrair prou tot el que heu fet per mi. Gràcies!

Agraeixo als meus directors de tesi, Josep Manel Ricart i Anna Clotet, haver-me permès incorporar-me al seu grup, donar-me l'oportunitat de realitzar aquesta tesi i la seva ajuda. A la resta dels *seniors* i col·laboradors directes de l'Àrea de química quàntica, gràcies sense excepció ja que de tots i cada un de vosaltres també he après molt.

Menció especial mereixen en Jose C., en Joan i L'Elisenda, pel seu magnífic treball al càrrec de la 'maquinaria' del grup i, concretament per haver estat els "metges de capçalera" del meu ordinador.

El meu agraïment més especial és, però, pels meus "companys de la ex-5ena planta": l'Alfred, en Paco, en Gerard, en Benjamí, en Dani, la Isa, la Susanna, l'Esther, l'Elena, la Núria, en Jesús, en David, el Campa, l'Elies, en Xavi, en Jose, en Jorge i en Juan Miquel ... i per als fitxatges més recents, en Toni i en Jordi. Moltíssimes gràcies!!!!!!!!!!!!!!

Vull donar gràcies a Philippe Sautet i Françoise Delbecq, per haver-me acollit al seu grup a l'*Ecole Normale Supérieure* de Lyon i fer-me sentir com a casa. El capítol 5 d'aquesta tesi no hagués estat possible sense la seva valuosa col·laboració. A la resta de companys de Lyon, també gràcies.

Vull agrair a Christian Minot i Alexis Markovits per donar-me l'oportunitat de fer una profitosa estada el seu grup a la Universitat *Pierre et Marie Curie* de Paris.

En l'àmbit institucional vull agrair a la Generalitat de Catalunya la concessió d'una beca pre-doctoral i a la Unió Europea la beca *Marie Curie*. També, vull expressar el meu agraïment la Universitat Rovira i Virgili i, especialment, al Departament de Química Física i Inorgànica.

Finalment, gràcies a les meves amigues, especialment a la Iolanda per la seva ajuda inestimable en la confecció de la portada i per donar-me un copet de mà amb la llengua de Shecspir.