

4.3 PARTICIPACION EN PROYECTOS ÚLTIMOS 5 AÑOS, SUBSIDIOS RECIBIDOS:

-“Cinética y Fotoquímica de Procesos de Interés Ambiental”, UNMDP, subdirector (año 2000 y hasta la fecha).

“Modificación de semiconductores y matrices inertes con colorantes para su uso como fotocatalizadores o fotosensibilizadores en procesos de interés ambiental” Subsidio del CONICET PIP 5472, Codirector.

“Caracterización, cuantificación y aprovechamiento de intermediarios reactivos generados mediante excitación directa ó sensibilización de dióxido de titanio”, subsidio PICTO 2002 06-11307 , Director del proyecto

“Degradación fotocatalítica homogénea y heterogénea de contaminantes en presencia de complejos de hierro(III)”
Participante por la Argentina del Proyecto Conjunto subsidiado por el CONICET y el CNRS en el marco de Acuerdos de Cooperación Internacional, Res. N° 2311 29/12/04, coordinado por Dr. Michele Bolte Laboratoire de Photochimie Moléculaire et Macromoléculaire, Université Blaise Pascal (Francia) y la Dra. Litter, CNEA (Argentina).

<Estudios fotocatalíticos aplicados a la oxidación de contaminantes ambientales>, subsidio PICT98 06-04031. Director del proyecto

<Estudio de los factores que determinan las eficiencias cuánticas en procesos fotocatalíticos>, subsidio PEI 0261/97 (Resolución 623/97).-

-“Aplicaciones de Técnicas Espectroscópicas inducidas por Laser al estudio de la Fotofísica y la Termoquímica de Sistemas en fases Condensadas”, Fundación Antorchas - Proyecto de colaboración entre grupos argentinos. Participación como Investigador Integrante grupo UNMDP

-“Derivación de Parámetros Termodinámicos por medio de Espectroscopía Optoacústica Inducida por Laser: Aplicación a la reacción de Fotoproducción del Anión Radical Sulfato”, Fundación Antorchas- Proyecto de colaboración entre grupos argentinos. Participación como Investigador Integrante grupo UNMDP .

4.3 PRODUCCION CIENTIFICA:

Co-autora de 35 publicaciones en revistas internacionales y 3 en revistas nacionales con referato.

Co-autora de más de 50 presentaciones a congresos (nacionales + internacionales).

5.1 DETALLE DE LA PRODUCCION EN INVESTIGACION CIENTIFICA DE LOS ULTIMOS 5 AÑOS

Publicaciones:

- (27) Photocatalytic degradation of phthalic acid on TiO₂ nanoparticles, A. V. Taborda, M. A. Brusa, and M. A. Grela, *Applied Catalysis A: General*, **2001**, 208,419.
- (28) Experimental evidence in favor of an initial one-electron transfer process in the heterogeneous photocatalytic reduction of Cr(VI) over TiO₂, J.J. Testa, M. A. Grela and M. I. Litter, *Langmuir*, **2001**, 17, 3515.
- (29) "Yield of carboxyl anion radicals in the photocatalytic degradation of formate over TiO₂ particles" Laura L. Perissinotti, Marta A. Brusa and María A. Grela, *Langmuir*, **2001**, 17, 8422.
- (30) "Time resolved photoacoustic calorimetry of aqueous peroxodisulfate photolysis in the presence of nitrite anions" M. S. Churio, M. A. Brusa, M. A. Grela, S. Bertolotti and C. Previtali, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2003**, 5, 902 - 906.
- (31) "The Reaction of Lithium Metal with Benzil in THF: A Kinetic Study" N.S. Nudelman, S. Velurtas, and Maria A. Grela *J. Phys. Org. Chem.*, **2003**, 16, 669 - 674.
- (32) "Application of photoacoustic calorimetry to the determination of volume changes in reactions involving radical anions in aqueous solutions" María S. Churio, Marta A. Brusa, María A. Grela, *Photochem. Photobiol. Sci.*, **2003**, 2, 754 - 758.
- (33) "Experimental upper bound on phosphate radical production in TiO₂ photocatalytic transformations in the presence of phosphate ions" Marta A. Brusa and María A. Grela, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2003**, 5, 3294 - 3298.
- (34) Heterogeneous Photocatalytic Reduction of Chromium (VI) over TiO₂ particles in the Presence of Oxalate. Involvement of Cr (V) species, J.J. Testa, M. A. Grela and M. I. Litter, *Environ. Sci. & Technol*, **2004**, 38, 1589-1594.
- (35) Photon Flux and Wavelength Effects on the Selectivity and Product Yields of the Photocatalytic Air Oxidation of Neat Cyclohexane on TiO₂ particles", Marta A. Brusa and María A. Grela, *J. Phys. Chem. B*, **2005**, 109, 1914-1918.
- (36) Heterogeneous photocatalysis of Cr(VI) in the presence of citric acid over TiO₂ particles: relevance of Cr(V)-citrate complexes Jorge M. Meichtry, Marta Brusa, Michele Bolte, María A. Grela, Marta I. Litter, *Applied Catalysis B*, **2006**, 71, 101-107.
- (37) Photocatalytic Air Oxidation of Cyclohexane in CH₂Cl₂-C₆H₁₂ mixtures over TiO₂ particles. An attempt to rationalize the positive effect of dichloromethane on the yields of valuable oxygenates M. A. Brusa, Y. Di Iorio, M. S. Churio and M. A. Grela *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, publicado en la web : doi.org/10.1016/j.molcata.2006.12.008

Trabajos aceptados para su publicación:

- (38) Effect of bioturbation by *Chasmagnathus granulatus* on the chemical characteristics and nutrients distribution in SW Atlantic intertidal sediments, Fanjul ME, Grela MA, Iribarne O., Marine Ecology Progress Series, en prensa.

5.2 CAPITULOS DE LIBRO

- Los Mecanismos de Destrucción de Contaminantes Orgánicos, M.A. Grela, B. Loeb, G.M. Restrepo, M.G. Lagorio, E. San Román, en "Eliminación de Contaminantes por Fotocatálisis Heterogénea",
1) Ed. M.A. Blesa, Red CyTED VIII-G, 2001, Cap. 5
2) Reedición actualizada: Eds. M.A. Blesa y B. Sánchez, Red CyTED VIII-G, 2004, Cap. 5

5.3 PUBLICACIONES 1982-2000

- (1) "The effective potential of β bonds in free radicals", M. A. Grela and A. J. Colussi, *J. Phys. Chem.*, 1982, 86 ,4844.
- (2) "Pyrolysis of ethylenediamines, the stabilization energies of aminomethyl and N,N dimethylaminomethyl radicals", M. A. Grela and A. J. Colussi, *J. Phys. Chem.*, 1984, 88, 24.
- (3) "Very low pressure pyrolysis of furan, 2-methylfuran and 2,5-dimethylfuran. The stability of the furan ring" . M. A. Grela, V. T Amorebieta and A. J. Colussi, *J. Phys. Chem.*, 1985, 89 ,38.
- (4) "Pyrolysis of 2-Phenylethylamines. Heats of formation of aminomethyl radicals." M. A. Grela and A. J. Colussi, *Int. J. Chem. Kinet.*, 1985, 17,257.
- (5) "Kinetics of iodine dissociation on silica surfaces between 800-1000 K", M. A. Grela and A. J. Colussi, *An. Asoc. Quím. Argen.*, 1987, 73 (2), 131.
- (6) "Kinetics and mechanism of the thermal decomposition of unsaturated aldehydes : benzaldehyde, 2 butenal and 2-furaldehyde" M. A. Grela and A. J. Colussi, *J. Phys. Chem.*, 1986, 90, 434.
- (7) "Vacuum pyrolysis of furfural : a facile synthesis of vinylketene " M. A. Grela, and A. J. Colussi, *An. Asoc. Quím. Argen.*, 1987 , 75 (1), 111.
- (8) "Systematic characterization of transition states for radical decompositions" M. A. Grela and A. J. Colussi, *Int. J. Chem. Kinet.*, 1987, 19, 869.
- (9) "Decomposition of methylamino and aminomethyl radicals. The heats of formation of methyleneimine (CH₂=NH) and hydrazyl (.N₂H₃) radical".M. A. Grela and A. J. Colussi, *Int. J. Chem. Kinet.*, 1988, 20, 713.
- (10) "The thermodynamic functions of a Poschl-Teller oscillator" M. A. Grela, *J. Chem. Educ.*, 1990, 65, 390.
- (11) "Pyrolysis of styrene. Kinetics and equilibrium: Styrene→ Benzene + Acetylene " M. A. Grela, V. T. Amorebieta and A. J. Colussi., *J. Phys. Chem.*, 1992, 96, 9861.
- (12) "Very low pressure pyrolysis of phenylacetic acid" M. A. Grela, V. T. Amorebieta and A. J. Colussi, *J. Chem. Soc. Faraday Trans.*, 1992, 88, 2125.
- (13) "High Temperature oxidation of methyl radicals in open systems" M. A. Grela, V. T. Amorebieta and A. J. Colussi, *J. Phys. Chem.*, 1992, 96, 7013.

(14) "Kinetics and Thermochemistry of Chlorine and Nitrogen-Containing Oxides and Peroxides" A. J. Colussi and M. A. Grela, *J. Phys. Chem.*, **1993**, *97*, 3775.

(15) "Rate of the reaction between oxygen monofluoride and ozone. Implications for the atmospheric role of fluorine" A. J. Colussi and M. A. Grela, *Chem. Phys. Lett.*, **1994**, *229*, 134.

(16) "Bifurcation Analysis of Methyl Radical Oxidation in Open System. The low pressure regime" M. A. Grela and A. J. Colussi, *Twenty-Fifth Symposium on combustion. The combustion Institute*, **1994**, 733.

(17) "Quantitative Structure-Stability Relationships for Oxides and Peroxides of Potential Atmospheric Significance" M. A. Grela and A. J. Colussi, *J. Phys. Chem.*, **1996**, *100*, 10150.

(18) "On the Yields of intermediates formed in the photoreduction of benzophenone" C. A. Viltres Costa, M. A. Grela and M. S. Churio, *J. Photochem. Photobiol. A: Chem.*, **1996**, *99*, 51.

(19) "Quantitative Spin-Trapping Studies of weakly illuminated titanium dioxide sols. Implications for the mechanism of photocatalysis" M. A. Grela, M. E. J. Coronel and A. J. Colussi, *J. Phys. Chem.*, **1996**, *100*, 16940.

(20) "Kinetics of stochastic charge transfer and recombination events in semiconductor colloids. Relevance to photocatalysis efficiency" M. A. Grela and A. J. Colussi, *J. Phys. Chem.*, **1996**, *100*, 18214.

(21) "Photochemistry of benzophenone photoreduction in 2-propanol" M. S. Churio and M. A. Grela, *J. Chem. Educ.*, **1997**, *74*, 436.

(22) "Harnessing excess photon energy in photoinduced surface electron transfer between salicylate and illuminated titanium dioxide" M. A. Grela, M. A. Brusa and A. J. Colussi, *J. Phys. Chem. B*, **1997**, *101*, 10986.

(23) "Thermochemical Kinetics of bromine nitrate, bromine nitrite, dichlorine pentoxide, peroxy-carboxylic acid and diacyl peroxides" M. A. Grela and A. J. Colussi, *Int. J. Chem. Kinet.*, **1998**, *30*, 41.

(24) "Photon energy and photon intermittence effects on the quantum efficiency of photoinduced oxidations in crystalline and metastable TiO₂ colloidal nanoparticles" M. A. Grela and A. J. Colussi, *J. Phys. Chem. B*, **1999**, *103*, 2614.

(25) Efficiency of hot carrier trapping by outer-sphere redox probes at quantum dot interfaces" M. A. Grela, M. A. Brusa and A. J. Colussi, *J. Phys. Chem. B*, **1999**, *103*, 6400.

(26) Reaction volume and reaction enthalpy upon aqueous peroxodisulfate dissociation: $S_2O_8^{2-} \rightarrow 2 SO_4 \cdot^-$ M. A. Brusa, M. S. Churio, M. A. Grela, S. Bertolotti and C. Previtali, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2000**, *2*, 2383.

6. FORMACIÓN DE RECURSOS HUMANOS Y DIRECCIÓN DE INVESTIGADORES

- Directora de la Dra. Marta Brusa como Profesional Adjunto de la Carrera de Técnico de CONICET.
- Directora de la Beca de Postgrado de CONICET de Yesica Di Iorio (1-04-06 y continuo)

- Co-Directora de la Beca de CONICET de la Licenciada María Eugenia Fanjul (1-03-04 y continuo).
- Co-Directora de la Beca de Iniciación de la Universidad Nacional de Mar del Plata de la Licenciada María Eugenia Fanjul (1-07-03 y 1-03-04).
- Dirección de la Beca de Entrenamiento otorgada por la Comisión de Investigaciones Científicas: a la Srta Laura L. Perissinotti 1-10-00 y 1-11-01.
- Dirección de la Beca de Entrenamiento otorgada por la Comisión de Investigaciones Científicas: a la Srta Andrea Taborda 1-9-98 / 1-9-99.
- Dirección de la Beca Post-Doctoral del Dr. Ignacio Gil Torro, 20-8/10-10 1997, otorgada por el Instituto de Cooperación Iberoamericano.
- Co-dirección de la Beca Mutis otorgada a la Licenciada Carmen Viltres Costa, 1/96-12/96.
- Tutora de las pasantías de investigación de las Estudiantes Ma. Laura DellÁrciprette y Yessica Di Iorio 1-05-03 - 1-12-03 y de Giardina 1-03-05 / 1-07-05.

7. MIEMBRO DE COMISIONES ASESORAS

- Directora de la Comisión de Postgrado del Area de Química de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, UNMDP (OCA 877) (1-7-2002 y continuo)
- Jurado de Tesis para optar por el titulo de Doctor en Ciencias Químicas de la Universidad Nacional de Buenos Aires de la Licenciada Carina Emilio (13-12-06)
- Jurado de Tesis para optar por el titulo de Magíster en Ingeniería Química de la Universidad Nacional de Mar del Plata de la Ingeniera Alejandra Ayude(26-09-03)
- Jurado de Tesis para optar por el titulo de Doctor en Ciencias Químicas de la Universidad Nacional de Buenos Aires del Licenciado Pablo Mandelbaum (12-10-99)
- Miembro de la Comisión de Tesis de Sara Mendiara (1990-1997), para acceder al titulo de Doctor en Ciencias Químicas, Facultad de Ciencias Exactas. UNMDP
- Miembro de la Comisión Asesora para la Actualización y Reformulación del plan de estudio de la Licenciatura en Química de la Facultad de Ciencias Exactas. UNMDP por Resolución del Decano. (Marzo 1998).

8. PARTICIPACIÓN EN ASOCIACIONES CIENTÍFICAS

- Delegada Regional de la Asociación Argentina de Investigaciones en Físicoquímica (1993- y continuo).
- Miembro de la American Chemical Society (1991- y continuo)

9. RESPONSABILIDADES EN GESTION Y EXTENSION

- Miembro del Comité Organizador y Académico Local de la 11ª Olimpiada Argentina de Química realizada en la Ciudad de Mar del Plata, 5-9 de Noviembre de 2001.
- Coordinadora del Comité Organizador y Académico Local de la 7ª Olimpiada Iberoamericana de Química realizada en la Ciudad de Mar del Plata, 15-23 de Octubre de 2002.

- Directora del Departamento de Química de la Facultad de Ciencias Exactas y Naturales de la Universidad Nacional de Mar del Plata (Febrero de 2002-Septiembre 2002)