



Ministerio de Economía y Competitividad.
Secretaría de Estado de Investigación, Desarrollo e Innovación

Currículum

Nombre: EMILIO AICART SOSPEDRA

Fecha: 06 / 03 / 2014

Apellidos: **AICART SOSPEDRA**

Nombre: **EMILIO**

D.N.I.:

Fecha de nacimiento:

Sexo: varón

Situación profesional actual

Organismo: UNIVERSIDAD COMPLUTENSE

Facultad, Escuela o Instituto: FACULTAD DE CIENCIAS QUIMICAS

Depto./Secc./Unidad estr.: DEPARTAMENTO DE QUIMICA FISICA I

Dirección postal: Ciudad Universitaria s/n, 28040-MADRID

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 91-3944208

Móvil:

Fax: 91-3944135

Correo electrónico: aicart@quim.ucm.es

Website: <http://www.ucm.es/info/coloidal/index.html>

Especialización (Códigos UNESCO): 2307, 2406, 221004, 221005, 221016, 221019, 221030, 221032

Categoría profesional: CATEDRÁTICO DE UNIVERSIDAD Fecha de inicio: 2004

Situación administrativa

Plantilla Contratado Interino Becario

Otras situaciones especificar:

Dedicación A tiempo completo

A tiempo parcial

Líneas de investigación

Breve descripción, por medio de palabras claves, de la especialización y líneas de investigación actuales.

Ciclodextrinas, Fármacos, Tensioactivos, Carbohidratos, Complejos de Inclusión, Reconocimiento Molecular, Biotermodinámica, Electroquímica, Fluorescencia, UV-VIS, RMN, Difracción de Rayos-X, Calorimetría, Micelas Mixtas, Vesículas, Liposomas, Solubilización, Sistemas Coloidales, Sistemas Complejos, Fenómenos de auto-organización, Membranas, Turbidimetría, Electroacústica, Química Coloidal y Supramolecular, Terapia Génica, ADN, Nanocompactación, Lipoplejos, Surfoplejos, Nanopartículas magnéticas, Nanoestructuras Coloidales.

Formación Académica

<u>Titulación Superior</u>	<u>Centro</u>	<u>Fecha</u>
LICENCIADO C. QUIMICAS	FAC. CIENCIAS, VALENCIA	1975
<u>Doctorado</u>	<u>Centro</u>	<u>Fecha</u>
CIENCIAS QUIMICAS	FAC. QUIMICAS, COMPLUTENSE	1980

Actividades anteriores de carácter científico profesional

<u>Puesto</u>	<u>Institución</u>	<u>Fechas</u>
Prof. Ayudante Química Física	Fac. C. Químicas, Complutense	1975-82
Prof. Colaborador Química Física	Fac. C. Químicas, Complutense	1982-84
Prof. Titular de Universidad	Fac. C. Químicas, Complutense	1985-2004
Catedrático de Universidad	Fac. C. Químicas, Complutense	2004-continúa

Idiomas (R = regular, B = bien, C = correctamente)

<u>Idioma</u>	<u>Habla</u>	<u>Lee</u>	<u>Escribe</u>
INGLÉS	C	C	C
FRANCÉS	B	C	C
ITALIANO	R	R	R
PORTUGUÉS	R	B	R
CATALÁN	C	C	R
GALLEGO	R	B	R

Participación en Proyectos de I+D financiados en Convocatorias públicas.
(nacionales y/o internacionales)

- 1.- *Título del proyecto:* Automatización de medidas de propiedades termodinámicas de exceso. (PB81-554)
Entidad financiadora: CAICYT
Duración, desde: Nov. 1982 *hasta:* Octubre 1985 *Cuantía de la subvención:* 17.500.000.- pta.
Investigador responsable: MATEO DIAZ PEÑA
Número de investigadores participantes: 6
-
- 2.- *Título del proyecto:* Estudio conformacional de moléculas y macromoléculas disueltas en micelas y microemulsiones mediante una técnica de absorción ultrasónica. (PB86-568)
Entidad financiadora: CAICYT
Duración, desde: Nov. 1987 *hasta:* Octubre 1990 *Cuantía de la subvención:* 5.500.000.- pta.
Investigador responsable: GLORIA TARDAJOS RODRIGUEZ
Número de investigadores participantes: 5
-
- 3.- *Título del proyecto:* Cinética de sistemas mimetizadores de membranas mediante una técnica de absorción ultrasónica. (PB89-113)
Entidad financiadora: DGICYT
Duración, desde: Nov. 1990 *hasta:* Octubre 1992 *Cuantía de la subvención:* 8.500.000.- pta.
Investigador principal: GLORIA TARDAJOS RODRÍGUEZ
Número de investigadores participantes: 6
-
- 4.- *Título del proyecto:* Nuevas Tecnologías: Nuevos Materiales. (EC300-92)
Entidad financiadora: Comunidad Autónoma de Madrid
Duración, desde: Enero 1993 *hasta:* Dic. 1993 *Cuantía de la subvención:* 5.500.000.- pta.
Investigador principal: EMILIO AICART SOSPEDRA
Número de investigadores participantes: 5
-
- 5.- *Título del proyecto:* Microencapsulación de tensoagentes por formación de complejos de inclusión con ciclodextrinas o éteres-corona y su aplicación a la depuración de aguas residuales. (PB92-229)
Entidad financiadora: DGICYT
Duración, desde: Junio 1993 *hasta:* Mayo 1996 *Cuantía de la subvención:* 4.000.000.- pta.
Investigador principal: EMILIO AICART SOSPEDRA
Número de investigadores participantes: 4
-
- 6.- *Título del proyecto:* Espectrofotómetro UV-VIS con esfera integradora y controlador de temperatura. (IN95-508)
Entidad financiadora: CICYT
Duración, desde: Enero 1996 *hasta:* Dic. 1996 *Cuantía de la subvención:* 13.500.000.- pta.
Investigador principal: REYES JIMENEZ APARICIO
Número de investigadores participantes: 12
-

-
- 7.- *Título del proyecto:* Físicoquímica de la hidratación específica de carbohidratos y de su reconocimiento molecular por receptores modelo (ciclodextrinas y glicofanos). (PB95-356)
Entidad financiadora: DGES
Duración, desde: Nov. 1996 *hasta:* Octubre 1999 *Cuantía de la subvención:* 5.000.000.- pta.
Investigador principal: EMILIO AICART SOSPEDRA
Número de investigadores participantes: 4
-
- 8.- *Título de la Red Temática:* Microencapsulation for low cost, high volume pharmaceutical applications. (ERB BRRT-CT98-5100)
Entidad financiadora: COMUNIDAD EUROPEA (Industrial and Materials Technol. Programme)
Duración, desde: Enero 1999 *hasta:* Dic. 2001 *Cuantía de la subvención:* 15.240.- €
Investigador principal de la UCM: EMILIO AICART SOSPEDRA
Número de investigadores participantes de la UCM: 3
-
- 9.- *Título del Proyecto:* Caracterización químico-física de fármacos. Mejora de su biodisponibilidad por microencapsulación con nuevos excipientes. (PB98-755)
Entidad financiadora: DGES
Duración, desde: Dic. 1999 *hasta:* Dic. 2002 *Cuantía de la subvención:* 6.600.000.- pta.
Investigador principal: EMILIO AICART SOSPEDRA
Número de investigadores participantes: 3
-
- 10.- *Título del Proyecto:* Agregados supramoleculares: micelas mixtas y vesículas. Caracterización estructural, estabilidad coloidal y vectorización de moléculas con interés biológico. (BQU2002-586)
Entidad financiadora: MCYT
Duración, desde: Nov. 2002 *hasta:* Dic. 2005 *Cuantía de la subvención:* 54.250.- €
Investigador responsable: EMILIO AICART SOSPEDRA
Número de investigadores participantes: 4
-
- 11.- *Título del Proyecto:* Auto-organización y reconocimiento molecular en nanoestructuras coloidales. (CTQ2005-01106BQU).
Entidad financiadora: MEC
Duración, desde: Oct. 2005 *hasta:* Abril 2009 *Cuantía de la subvención:* 85.300.- €
Investigador responsable: ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ
Número de investigadores participantes: 5
-
- 12.- *Título del Proyecto:* Lipoplejos (genosomas): Vectores coloidales de transferencia génica. (PR27/05-14049)
Entidad financiadora: BSCH-UCM
Duración, desde: Dic. 2005 *hasta:* Dic. 2007 *Cuantía de la subvención:* 5.000.- €
Investigador responsable: ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ
Número de investigadores participantes: 4
-
- 13.- *Título del Proyecto:* Reconocimiento molecular y fisicoquímica de sustratos de interés biológico con nanoestructuras coloidales y supramoleculares. (ref. 910447)
Entidad financiadora: CAM-UCM. Programa anual de financiación de la CAM a Grupos de Investigación UCM consolidados
Duración, desde: Dic. 2005 *hasta:* Dic. 2006 *Cuantía de la subvención:* 6.600.- €
Investigador responsable: EMILIO AICART SOSPEDRA y ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ
Número de investigadores participantes: 4
-

- 14.- *Título del Proyecto:* Reconocimiento molecular y fisicoquímica de sustratos de interés biológico con nanoestructuras coloidales y supramoleculares. (910447)
Entidad financiadora: UCM - CAM Programa anual de financiación de la CAM a Grupos de Investigación UCM consolidados
Duración, desde: Dic. 2006 *hasta:* Dic. 2007 *Cuantía de la subvención:* sin financiación
Valoración Positiva
Investigadores responsables: EMILIO AICART SOSPEDRA y ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ
Número de investigadores participantes: 4
-
- 15.- *Título del Proyecto:* Sistemas coloidales de tensioactivos mezclados: micelas, vesículas y liposomas mixtos. (A/3263/05)
Entidad financiadora: AECI
Duración, desde: Enero 2006 *hasta:* Dic. 2006 *Cuantía de la subvención:* 8.400.- €
Investigador responsable: EMILIO AICART SOSPEDRA
Número de investigadores participantes: 7
-
- 16.- *Título del Proyecto:* Equipo de relajación ultrasónica. (UCMA05-33-010)
Entidad financiadora: MEC-UCM
Duración, desde: Enero 2005 *hasta:* Dic. 2007 *Cuantía de la subvención:* 126.200.- €
Investigador responsable: EMILIO AICART SOSPEDRA
Número de investigadores participantes: 14
-
- 17.- *Título del Proyecto:* Red temática de coloides e interfases (COLINTER). (CTQ2006-27199-E/PPQ)
Entidad financiadora: MEC
Duración, desde: Enero 2007 *hasta:* Dic. 2007 *Cuantía de la subvención:* 12000.- €
Investigador responsable de la UCM: EMILIO AICART SOSPEDRA y ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ
Coordinador general: ROQUE HIDALGO ALVAREZ
Número de investigadores participantes: 29
-
- 18.- *Título del Proyecto:* Aproximación multidimensional a la identificación y caracterización de nuevas dianas terapéuticas y al desarrollo de nuevos fármacos mediante el empleo de química modular, nanocristales semiconductores (*quantum dots*) y proteómica. (S-SAL-0249-2006)
Entidad financiadora: CAM
Duración, desde: Enero 2007 *hasta:* Dic. 2010 *Cuantía de la subvención:* 700.000.- €
Investigador responsable: MARÍA LUZ LÓPEZ RODRÍGUEZ, EMILIO AICART SOSPEDRA, ROBERTO FERNÁNDEZ DE LA PARADILLA SAINZ DE AJA
Número de investigadores participantes: 21
-
- 19.- *Título del Proyecto:* Reconocimiento molecular y fisicoquímica de sustratos de interés biológico con nanoestructuras coloidales y supramoleculares. (ref . 910447), (CCG07-UCM/PPQ-2606)
Entidad financiadora: CAM-UCM. Programa anual de financiación de la CAM a Grupos de Investigación UCM consolidados
Duración, desde: Enero 2008 *hasta:* Dic. 2008 *Cuantía de la subvención:* 4994,17.- €
Investigador responsable: EMILIO AICART SOSPEDRA y ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ
Número de investigadores participantes: 4
-

- 20.- *Título del Proyecto:* Nanocompactación coloidal del ADN: una aproximación experimental y teórica
Entidad financiadora: MEC (FIS2008-06197-C02-01)
Duración, desde: Enero 2009 *hasta:* Dic. 2009 *Cuantía de la subvención:* 20.000.- €
Investigador responsable-Coordinador: ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ
Número de investigadores participantes: 4
-
- 21.- *Título del Proyecto:* Reconocimiento molecular y fisicoquímica de sustratos de interés biológico con nanoestructuras coloidales y supramoleculares. (ref. 910447), (GR58/08)
Entidad financiadora: SCH-UCM. Programa anual de financiación a Grupos de Investigación UCM consolidados
Duración, desde: Enero 2009 *hasta:* Dic. 2010 *Cuantía de la subvención:* 4450.- €
Investigador responsable: EMILIO AICART SOSPEDRA y ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ
Número de investigadores participantes: 5
-
- 22.- *Título del Proyecto:* Compactación de DNA/siRNA con nuevos lípidos gemini: Transfección de formulaciones en terapia génica
Entidad financiadora: MICINN (ACI2009-0867)
Duración, desde: Dic. 2009 *hasta:* Dic. 2013 *Cuantía de la subvención:* 56.000.- €
Investigador responsable: EMILIO AICART SOSPEDRA y ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ
Número de investigadores participantes: 4
-
- 23.- *Título del Proyecto:* Compactación del ADN mediante nanoagregados coloidales: lipoplejos y surfoplejos
Entidad financiadora: MICINN (CTQ2009-10002BQU)
Duración, desde: Enero 2010 *hasta:* Junio 2013 *Cuantía de la subvención:* 78.000.- €
Investigador responsable-Coordinador: ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ
Número de investigadores participantes: 5
-
- 24.- *Título del Proyecto:* Reconocimiento molecular y fisicoquímica de sustratos de interés biológico con nanoestructuras coloidales y supramoleculares. (ref. 910447), (GR35/10-A)
Entidad financiadora: SCH-UCM. Programa anual de financiación a Grupos de Investigación UCM consolidados
Duración, desde: Enero 2011 *hasta:* Dic. 2011 *Cuantía de la subvención:* 2328.- €
Investigador responsable: EMILIO AICART SOSPEDRA y ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ
Número de investigadores participantes: 5
-
- 25.- *Título del Proyecto:* Nuevos vectores coloidales biocompatibles de compactación y transfección del DNA o siRNA: una aproximación multidisciplinar
Entidad financiadora: MEC (CTQ2012-30821)
Duración, desde: Enero 2013 *hasta:* Diciembre 2015 *Cuantía de la subvención:* 81.000.- €
Investigador responsable-Coordinador: ELENA JUNQUERA GONZÁLEZ
Número de investigadores participantes: 5
-

Publicaciones o Documentos Científico-Técnicos

(CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = "review", E = editor,
S = Documento Científico-Técnico restringido)

- 1.- *Autores (p.o. de firma):* E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña
Título: Isothermal compressibility of cyclohexane + n-hexane, cyclohexane + n-heptane, cyclohexane + n-octane, and cyclohexane + n-nonane.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL ENGINEERING DATA
Clave: A *Volumen:* 25 *Páginas, inicial:* 140 *final:* 145 *Fecha:* 1980

- 2.- *Autores:* E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña
Título: Thermodynamics of (cyclohexane + benzene) at various temperatures.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL THERMODYNAMICS
Clave: A *Volumen:* 12 *Páginas, inicial:* 1085 *final:* 1091 *Fecha:* 1980

- 3.- *Autores:* E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña
Título: Isothermal compressibility of cyclohexane-n-decane, cyclohexane-n-dodecane, and cyclohexane-n-tetradecane.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL ENGINEERING DATA
Clave: A *Volumen:* 26 *Páginas, inicial:* 22 *final:* 26 *Fecha:* 1981

- 4.- *Autores:* E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña
Título: Isothermal compressibility and derived properties of the benzene + toluene system at various temperatures.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL ENGINEERING DATA
Clave: A *Volumen:* 26 *Páginas, inicial:* 283 *final:* 286 *Fecha:* 1981

- 5.- *Autores:* E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña
Título: Isothermal compressibility of cyclohexane + n-tridecane and + n-pentadecane at 298.15, 308.15, 318.15, and 333.15 K.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL THERMODYNAMICS
Clave: A *Volumen:* 13 *Páginas, inicial:* 783 *final:* 788 *Fecha:* 1981

- 6.- *Autores:* J. Garbajosa, G. Tardajos, E. Aicart y M. Díaz Peña
Título: Isothermal compressibility of toluene + n-hexane and + n-octane at 298.15, 308.15, 318.15, and 333.15 K.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL THERMODYNAMICS
Clave: A *Volumen:* 14 *Páginas, inicial:* 671 *final:* 677 *Fecha:* 1982

- 7.- *Autores:* E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña
Título: Compressibilities of cyclohexane and toluene mixtures at various temperatures.
Ref. revista / Libro: J. SOLUTION CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 11 *Páginas, inicial:* 557 *final:* 564 *Fecha:* 1982

- 8.- *Autores:* E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña
Título: Correlation of the Prigogine-Flory theory with isothermal compressibility data. I. Systems with quasi-spherical molecules.
Ref. revista / Libro: J. SOLUTION CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 12 *Páginas, inicial:* 41 *final:* 51 *Fecha:* 1983

- 9.- *Autores:* M. Díaz Peña, A. Lainez, M. M. Rodrigo y E. Aicart
Título: Excess functions of (1-bromobutane + benzene) at various temperatures.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL THERMODYNAMICS
Clave: A *Volumen:* 15 *Páginas, inicial:* 559 *final:* 565 *Fecha:* 1983
-
- 10.- *Autores:* E. Aicart, M. K. Kumaran, C. J. Halpin y G. C. Benson
Título: Ultrasonic speeds and isentropic compressibilities of n-heptane with hexane isomers at 298.15 K.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL THERMODYNAMICS
Clave: A *Volumen:* 15 *Páginas, inicial:* 919 *final:* 925 *Fecha:* 1983
-
- 11.- *Autores:* E. Aicart, C. Menduiña, R. L. Arenosa y G. Tardajos
Título: Correlation of the Prigogine-Flory theory with isothermal compressibility and excess enthalpy data for benzene + n-alkane mixtures.
Ref. revista / Libro: J. SOLUTION CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 12 *Páginas, inicial:* 703 *final:* 716 *Fecha:* 1983
-
- 12.- *Autores:* E. Aicart, M. K. Kumaran, C. J. Halpin y G. C. Benson
Título: Ultrasonic speeds and isentropic compressibilities of 2-methylpentan-1-ol with hexane isomers at 298.15 K.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL THERMODYNAMICS
Clave: A *Volumen:* 15 *Páginas, inicial:* 1189 *final:* 1197 *Fecha:* 1983
-
- 13.- *Autores:* M. L. Rey, E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña
Título: Thermodynamics of methylcyclohexane mixtures from isothermal compressibility data.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL SOCIETY, FARADAY TRANSACTIONS 2
Clave: A *Volumen:* 80 *Páginas, inicial:* 437 *final:* 446 *Fecha:* 1984
-
- 14.- *Autores:* E. Aicart, C. Menduiña, R. L. Arenosa y G. Tardajos
Título: Correlation of the Prigogine-Flory theory with isothermal compressibility data and excess enthalpy for cyclohexane + n-alkane mixtures.
Ref. revista / Libro: J. SOLUTION CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 13 *Páginas, inicial:* 443 *final:* 455 *Fecha:* 1984
-
- 15.- *Autores:* G. Tardajos, E. Aicart y M. Díaz Peña
Título: Isobaric thermal expansion coefficient of benzene + n-decane, and + n-tetradecane mixtures at various temperatures.
Ref. revista / Libro: FLUID PHASE EQUILIBRIA
Clave: A *Volumen:* 20 *Páginas, inicial:* 87 *final:* 92 *Fecha:* 1985
-
- 16.- *Autores:* M. L. Rey, E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña
Título: Termodinámica de metilciclohexano + tolueno y + ciclohexano a partir de medidas de compresibilidad isotérmica.
Ref. revista / Libro: BOLETIN SOCIEDAD QUIMICA PERU
Clave: A *Volumen:* LII *Páginas, inicial:* 52 *final:* 64 *Fecha:* 1986
-
- 17.- *Autores:* G. Tardajos, M. Díaz Peña y E. Aicart
Título: Speed of sound in pure liquids by a pulse-echo-overlap method.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL THERMODYNAMICS
Clave: A *Volumen:* 18 *Páginas, inicial:* 683 *final:* 689 *Fecha:* 1986
-

- 18.- *Autores:* I. Gamboa, G. Tardajos, M. Díaz Peña y E. Aicart
Título: Isothermal compressibility of toluene + n-decane, and + n-dodecane at various temperatures.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL THERMODYNAMICS
Clave: A *Volumen:* 18 *Páginas, inicial:* 885 *final:* 890 *Fecha:* 1986
-
- 19.- *Autores:* G. Tardajos, E. Aicart, M. Costas y D. Patterson
Título: Liquid structure and second order mixing functions for benzene, toluene, and p-xylene + normal alkanes.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL SOCIETY, FARADAY TRANSACTIONS 1
Clave: A *Volumen:* 82 *Páginas, inicial:* 2977 *final:* 2987 *Fecha:* 1986
-
- 20.- *Autores:* G. Tardajos, M. Díaz Peña, A. Lainez y E. Aicart
Título: Speed of sound, isothermal compressibility and isobaric thermal expansivity of pure liquids.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL ENGINEERING DATA
Clave: A *Volumen:* 31 *Páginas, inicial:* 492 *final:* 493 *Fecha:* 1986
-
- 21.- *Autores:* M. Costas, H. V. Tra, D. Patterson, M. Cáceres, G. Tardajos y E. Aicart
Título: Liquid structure and second-order mixing functions for 1-chloronaphthalene with linear and branched alkanes.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL SOCIETY, FARADAY TRANSACTIONS 1
Clave: A *Volumen:* 84 *Páginas, inicial:* 1603 *final:* 1616 *Fecha:* 1988
-
- 22.- *Autores:* S. Pérez-Casas, E. Aicart, L. M. Trejo y M. Costas
Título: Excess heat capacities and excess volumes of chlorobenzene normal (C₆-C₁₆) or branched (C₆-C₁₆) alkanes.
Ref. revista / Libro: INTERNATIONAL DATA SERIES
Clave: A *Volumen:* SERIE A *Páginas, inicial:* 104 *final:* 123 *Fecha:* 1988
-
- 23.- *Autores:* E. Junquera, G. Tardajos y E. Aicart
Título: Speeds of sound and isentropic compressibilities of (cyclohexane + benzene) and (1-chlorobutane + n-hexane or n-heptane or n-decane) at 298.15 K.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL THERMODYNAMICS
Clave: A *Volumen:* 20 *Páginas, inicial:* 1461 *final:* 1467 *Fecha:* 1988
-
- 24.- *Autores:* A. D. Matilla, E. Aicart, M. Díaz Peña y G. Tardajos
Título: Isobaric thermal expansion and isothermal compressibility of ethylbenzene + n-hexane, and + n-octane at 298.15 and 318.15 K.
Ref. revista / Libro: J. SOLUTION CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 18 *Páginas, inicial:* 143 *final:* 150 *Fecha:* 1989
-
- 25.- *Autores:* E. Aicart, G. Tardajos y M. Costas
Título: The effect of order destruction and order creation in linear or branched alkane mixtures.
Ref. revista / Libro: J. SOLUTION CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 18 *Páginas, inicial:* 369 *final:* 377 *Fecha:* 1989
-
- 26.- *Autores:* A. D. Matilla, G. Tardajos, M. Díaz Peña y E. Aicart
Título: First and second thermodynamic mixing functions of ethylbenzene + n-nonane, + n-decane, and + n-dodecane at 25 and 45 °C.
Ref. revista / Libro: J. SOLUTION CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 18 *Páginas, inicial:* 893 *final:* 901 *Fecha:* 1989
-

- 27.- *Autores:* E. Junquera, E. Aicart y G. Tardajos
Título: Speed of sound and isentropic compressibility of (1-chlorobutane + n-undecane or n-dodecane or n-hexadecane) at 298.15 K.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL THERMODYNAMICS
Clave: A *Volumen:* 21 *Páginas, inicial:* 1223 *final:* 1230 *Fecha:* 1989
-
- 28.- *Autores:* E. Aicart, M. Costas, E. Junquera y G. Tardajos
Título: Ultrasonic speeds and isentropic compressibilities of (1,4-dioxane + n-heptane or n-decane or n-tetradecane).
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL THERMODYNAMICS
Clave: A *Volumen:* 22 *Páginas, inicial:* 1153 *final:* 1158 *Fecha:* 1990
-
- 29.- *Autores:* A. D. Matilla, G. Tardajos y E. Aicart
Título: First and second thermodynamic mixing properties of ethylbenzene + n-alkanes. Experimental and theory.
Ref. revista / Libro: J. SOLUTION CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 19 *Páginas, inicial:* 1137 *final:* 1151 *Fecha:* 1990
-
- 30.- *Autores:* A. D. Matilla, G. Tardajos, E. Junquera y E. Aicart
Título: Thermodynamic properties for binary liquid mixtures of 1-chlorobutane + n-alkanes.
Ref. revista / Libro: J. SOLUTION CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 20 *Páginas, inicial:* 805 *final:* 816 *Fecha:* 1991
-
- 31.- *Autores:* E. Aicart, D. J. Jobe, B. Skalski y R. E. Verrall
Título: Ultrasonic relaxation studies of mixed micelles formed from propanol-decyltrimethylammonium bromide-water.
Ref. revista / Libro: J. PHYSICAL CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 96 *Páginas, inicial:* 2348 *final:* 2355 *Fecha:* 1992
-
- 32.- *Autores:* E. Junquera, E. Aicart y G. Tardajos
Título: Inclusional complexes of decyltrimethylammonium bromide and β -cyclodextrin in water.
Ref. revista / Libro: J. PHYSICAL CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 96 *Páginas, inicial:* 4533 *final:* 4537 *Fecha:* 1992
-
- 33.- *Autores:* D. J. Jobe, R. E. Verrall, B. Skalski y E. Aicart
Título: Ultrasonic relaxation studies of mixed micelles formed from alcohol-decyltrimethylammonium bromide-water.
Ref. revista / Libro: J. PHYSICAL CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 96 *Páginas, inicial:* 6811 *final:* 6817 *Fecha:* 1992
-
- 34.- *Autores:* D. J. Jobe, R. E. Verrall, E. Junquera y E. Aicart
Título: Effects of surfactant/ β -cyclodextrin complex formation on the surfactant monomer-micelle exchange rate in aqueous solutions of decyltrimethylammonium bromide.
Ref. revista / Libro: J. PHYSICAL CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 97 *Páginas, inicial:* 1243 *final:* 1248 *Fecha:* 1993
-
- 35.- *Autores:* A. D. Matilla, G. Tardajos y E. Aicart
Título: Thermodynamic mixing properties of chlorobenzene + an n-alkane.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL THERMODYNAMICS
Clave: A *Volumen:* 25 *Páginas, inicial:* 201 *final:* 207 *Fecha:* 1993
-

- 36.- *Autores:* A. D. Matilla, G. Tardajos, E. Aicart, S. Pérez-Casas, L. M. Trejo, M. Costas, D. Patterson y H. V. Tra
Título: van der Waals liquids, Flory theory and mixing functions for chlorobenzene with linear and branched alkanes.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL SOCIETY, FARADAY TRANSACTIONS
Clave: A *Volumen:* 89 *Páginas, inicial:* 89 *final:* 93 *Fecha:* 1993
-
- 37.- *Autores:* E. Junquera, G. Tardajos y E. Aicart
Título: Effect of the presence of β -cyclodextrin on the micellization process of sodium dodecylsulfate or sodium perfluorooctanoate in water.
Ref. revista / Libro: LANGMUIR
Clave: A *Volumen:* 9 *Páginas, inicial:* 1213 *final:* 1219 *Fecha:* 1993
-
- 38.- *Autores:* E. Junquera, G. Tardajos y E. Aicart
Título: Study of the 2,6-di-O-methyl- β -cyclodextrin + hexadecyltrimethylammonium bromide + water from speed of sound measurements.
Ref. revista / Libro: J. COLLOID INTERFACE SCIENCE
Clave: A *Volumen:* 158 *Páginas, inicial:* 388 *final:* 394 *Fecha:* 1993
-
- 39.- *Autores:* G. Tardajos, E. Junquera y E. Aicart
Título: Isothermal compressibility and isobaric thermal expansivity of linear and branched hexanols at 298.15 K.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL ENGINEERING DATA
Clave: A *Volumen:* 39 *Páginas, inicial:* 349 *final:* 350 *Fecha:* 1994
-
- 40.- *Autores:* E. Junquera, J. González-Benito, L. Peña y E. Aicart
Título: Encapsulation processes of dodecyltrimethylammonium bromide into the β -cyclodextrin or 2,6-di-O-methyl- β -cyclodextrin cavities from speed of sound data.
Ref. revista / Libro: J. COLLOID INTERFACE SCIENCE
Clave: A *Volumen:* 163 *Páginas, inicial:* 355 *final:* 361 *Fecha:* 1994
-
- 41.- *Autores:* E. Junquera, L. Peña y E. Aicart
Título: Influence of temperature on the micellization of sodium dodecylsulfate in water from speed of sound measurements.
Ref. revista / Libro: J. SOLUTION CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 23 *Páginas, inicial:* 421 *final:* 430 *Fecha:* 1994
-
- 42.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart
Título: A fully computerized technique to measure conductivity in liquid mixtures.
Ref. revista / Libro: REVIEW SCIENTIFIC INSTRUMENTS
Clave: A *Volumen:* 65 *Páginas, inicial:* 2672 *final:* 2674 *Fecha:* 1994
-
- 43.- *Autores:* E. Aicart, H. V. Tra, L. Andreoli-Ball y D. Patterson
Título: S-shaped composition dependence of excess thermodynamic quantities for cyclohexane mixtures with globular molecules.
Ref. revista / Libro: J. SOLUTION CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 23 *Páginas, inicial:* 1183 *final:* 1201 *Fecha:* 1994
-
- 44.- *Autores:* D. J. Jobe, R. E. Verrall, E. Junquera y E. Aicart
Título: Effects of β -cyclodextrin/surfactant complex formation on the surfactant monomer-micelle exchange in aqueous solutions of sodium perfluorooctanoate and β -cyclodextrin.
Ref. revista / Libro: J. PHYSICAL CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 98 *Páginas, inicial:* 10814 *final:* 10818 *Fecha:* 1994
-

- 45.- *Autores:* E. Aicart, E. Junquera, B. Skalski, D. J. Jobe y R. E. Verrall
Título: Estudio de sistemas micelares en presencia de alcoholes mediante medidas de conductividad, relajación ultrasónica y fluorescencia inducida por láser.
Ref. revista / Libro: PROPIEDADES, CARACTERIZACIÓN Y APLICACIONES DE LOS SISTEMAS COLOIDALES. ISBN: 84-8138-035-0
Editorial: Serv. Pub. Univ. Alcalá de Henares (España)
Clave: CL *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 135 *final:* 145 *Fecha:* 1994
-
- 46.- *Autores:* D. J. Jobe, R. E. Verrall, E. Junquera, L. Peña, J. González y E. Aicart
Título: Caracterización de los complejos de inclusión ciclodextrina/surfactante en disolución acuosa.
Ref. Libro: PROPIEDADES, CARACTERIZACIÓN Y APLICACIONES DE LOS SISTEMAS COLOIDALES. ISBN: 84-8138-035-0
Editorial: Serv. Pub. Univ. Alcalá de Henares (España)
Clave: CL *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 397 *final:* 399 *Fecha:* 1994
-
- 47.- *Autores:* R. E. Verrall, D. J. Jobe y E. Aicart
Título: Ultrasonic relaxation study of fast exchange processes in mixed micelle systems of alcohol-decyltrimethylammonium bromide-water.
Ref. revista / Libro: J. MOLECULAR LIQUIDS
Clave: A *Volumen:* 65/66 *Páginas, inicial:* 195 *final:* 204 *Fecha:* 1995
-
- 48.- *Autores:* L. Peña, E. Junquera y E. Aicart
Título: Ultrasonic study of the molecular encapsulation and micellization processes of dodecylethyldimethylammonium bromide water solutions in the presence of β -cyclodextrin or 2,6-di-O-methyl- β -cyclodextrin.
Ref. revista / Libro: J. SOLUTION CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 24 *Páginas, inicial:* 1075 *final:* 1091 *Fecha:* 1995
-
- 49.- *Autores:* E. Aicart, E. Junquera y T. M. Letcher
Título: Isobaric thermal expansivity and isothermal compressibility of several nonsaturated hydrocarbons at 298.15 K.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL ENGINEERING DATA
Clave: A *Volumen:* 40 *Páginas, inicial:* 1225 *final:* 1227 *Fecha:* 1995
-
- 50.- *Autores:* E. Junquera, L. Peña y E. Aicart
Título: A conductimetric study of the interaction of β -cyclodextrin or hydroxypropyl- β -cyclodextrin with dodecyltrimethylammonium bromide in water solution.
Ref. revista / Libro: LANGMUIR
Clave: A *Volumen:* 11 *Páginas, inicial:* 4685 *final:* 4690 *Fecha:* 1995
-
- 51.- *Autores:* E. Junquera, L. Peña y E. Aicart
Título: Conductivity studies of the molecular encapsulation of sodium perfluorooctanoate by β -cyclodextrin derivatives.
Ref. revista / Libro: J. INCLUSION PHENOMENA AND MOLECULAR RECOGNITION CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 24 *Páginas, inicial:* 233 *final:* 239 *Fecha:* 1996
-
- 52.- *Autores:* E. Junquera, L. Peña y E. Aicart
Título: Micellar behaviour of the aqueous solutions of dodecylethyldimethylammonium bromide. A characterization study in the presence and absence of hydroxypropyl- β -cyclodextrin.
Ref. revista / Libro: LANGMUIR
Clave: A *Volumen:* 13 *Páginas, inicial:* 219 *final:* 224 *Fecha:* 1997
-
- 53.- *Autores:* D. J. Jobe, R. E. Verrall, E. Junquera y E. Aicart

- Título:* Ultrasonic absorption studies of aqueous solutions of cetyltrimethylammonium bromide and 2,6-di-O-methyl- β -cyclodextrin.
Ref. revista / Libro: J. COLLOID INTERFACE SCIENCE
Clave: A *Volumen:* 189 *Páginas, inicial:* 294 *final:* 298 *Fecha:* 1997
-
- 54.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart
Título: Effect of the pH on the encapsulation of the salicylic acid/salicylate system by hydroxypropyl- β -cyclodextrin at 25 °C. A fluorescence enhancement study in aqueous solutions.
Ref. revista / Libro: J. INCLUSION PHENOMENA AND MOLECULAR RECOGNITION CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 25 *Páginas, inicial:* 119 *final:* 136 *Fecha:* 1997
-
- 55.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart
Título: Potentiometric study of the encapsulation of ketoprofen by hydroxypropyl- β -cyclodextrin. Temperature, solvent and salt effects.
Ref. revista / Libro: J. PHYSICAL CHEMISTRY B
Clave: A *Volumen:* 101 *Páginas, inicial:* 7163 *final:* 7171 *Fecha:* 1997
-
- 56.- *Autores:* E. Junquera, O. Pastor y E. Aicart
Título: Aggregation number of the n-octyl- β -glucopyranoside micelles in the presence and absence of salt at 298.15 K by a steady state fluorescence method.
Ref. revista / Libro: SPECTROS. BIOL. MOLEC.: MODERN TRENDS, ISBN: 0-7923-4685-8
Editorial: Kluwer Academic Pub., Dordrecht, Holanda
Clave: CL *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 331 *final:* 332 *Fecha:* 1997
-
- 57.- *Autores:* E. Junquera, O. Pastor y E. Aicart
Título: Encapsulation of the salicylic acid/salicylate system by hydroxypropyl- β -cyclodextrin at 25 °C. A fluorescence enhancement study in aqueous solutions.
Ref. revista / Libro: SPECTROS. BIOL. MOLEC.: MODERN TRENDS, ISBN: 0-7923-4685-8
Editorial: Kluwer Academic Pub., Dordrecht, Holanda
Clave: CL *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 397 *final:* 398 *Fecha:* 1997
-
- 58.- *Autores:* E. Junquera, L. Peña y E. Aicart
Título: Binding of sodium salicylate by β -cyclodextrin or 2,6-di-O-methyl- β -cyclodextrin in aqueous solution.
Ref. revista / Libro: J. PHARMACEUTICAL SCIENCES
Clave: A *Volumen:* 87 *Páginas, inicial:* 86 *final:* 90 *Fecha:* 1998
-
- 59.- *Autores:* O. Pastor, E. Junquera y E. Aicart
Título: Hydration and micellization processes of n-octyl- β -glucopyranoside in aqueous solution. A thermodynamic and fluorimetric study in the absence and presence of salts.
Ref. revista / Libro: LANGMUIR
Clave: A *Volumen:* 14 *Páginas, inicial:* 2950 *final:* 2957 *Fecha:* 1998
-
- 60.- *Autores:* E. Junquera, M. Martín-Pastor y E. Aicart
Título: Molecular encapsulation of flurbiprofen and/or ibuprofen by hydroxypropyl- β -cyclodextrin in aqueous solution. Potentiometric and molecular modeling studies.
Ref. revista / Libro: J. ORGANIC CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 63 *Páginas, inicial:* 4349 *final:* 4358 *Fecha:* 1998
-

- 61.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart
Título: A fluorimetric, potentiometric and conductimetric study of the aqueous solutions of naproxen and its association with hydroxypropyl- β -cyclodextrin.
Ref. revista / Libro: INTERNATIONAL J. OF PHARMACEUTICS
Clave: A *Volumen:* 176 *Páginas, inicial:* 169 *final:* 178 *Fecha:* 1999
-
- 62.- *Autores:* E. Junquera, V.G. Baonza y E. Aicart
Título: Energetics of the encapsulation of o-, m-, and p-hydroxybenzoic acids by β -cyclodextrin and its methylated and hydroxypropylated derivatives in aqueous. solution.
Ref. revista / Libro: CANADIAN J. CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 77 *Páginas, inicial:* 348 *final:* 355 *Fecha:* 1999
-
- 63.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart
Título: Thermodynamic analysis of the binding of an hepatoprotectant drug, the thioctic acid by β -cyclodextrin.
Ref. revista / Libro: J. PHARMACEUTICAL SCIENCES
Clave: A *Volumen:* 88 *Páginas, inicial:* 626 *final:* 631 *Fecha:* 1999
-
- 64.- *Autores:* E. Junquera, F. Mendicuti y E. Aicart
Título: Driving forces of the inclusion of the drug tolmetin by β -cyclodextrin in aqueous medium. Conductimetric and molecular modeling studies.
Ref. revista / Libro: LANGMUIR
Clave: A *Volumen:* 15 *Páginas, inicial:* 4472 *final:* 4479 *Fecha:* 1999
-
- 65.- *Autores:* E. Junquera, D. Ruiz y E. Aicart
Título: Role of the hydrophobic effect on the non-covalent interactions between salicylic acid and a series of β -cyclodextrins.
Ref. revista / Libro: J. COLLOID INTERFACE SCIENCE
Clave: A *Volumen:* 216 *Páginas, inicial:* 154 *final:* 160 *Fecha:* 1999
-
- 66.- *Autores:* N. Martínez, E. Junquera y E. Aicart
Título: Ultrasonic, density, and potentiometry characterization of the interaction of gentisic and gallic acids with an apolar cavity in aqueous solution.
Ref. revista / Libro: PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS (PCCP)
Clave: A *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 4811 *final:* 4817 *Fecha:* 1999
-
- 67.- *Autores:* C. Merino, E. Junquera, J. Jiménez-Barbero y E. Aicart
Título: Effect of the presence of β -cyclodextrin on the solute behavior of the procaine hydrochloride. Spectroscopic and thermodynamic studies.
Ref. revista / Libro: LANGMUIR
Clave: A *Volumen:* 16 *Páginas, inicial:* 1557 *final:* 1565 *Fecha:* 2000
-
- 68.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart
Título: An easy and fast experiment for the determination of the equilibrium constants of an acid/base pair, free and complexed with a molecular receptor.
Ref. revista / Libro: J. CHEMICAL EDUCATION
Clave: A *Volumen:* 77 *Páginas, inicial:* 1215 *final:* 1217 *Fecha:* 2000
-

- 69.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart
Título: Estudio termodinámico y espectroscópico de sistemas ternarios n-octil- β -glucopiranosido / sal / agua.
Ref. Libro: COLOIDES e INTERFASES. ISBN: 84-600-9686-6
Editorial: CSIC-Universitat de Barcelona, Barcelona
Clave: CL *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 153 *final:* 156 *Fecha:* 2000
-
- 70.- *Autores:* E. Junquera, J. C. Romero y E. Aicart
Título: Behavior of tricyclic antidepressants in aqueous solution: Self-aggregation and association with β -cyclodextrin.
Ref. revista / Libro: LANGMUIR
Clave: A *Volumen:* 17 *Páginas, inicial:* 1826 *final:* 1832 *Fecha:* 2001
-
- 71.- *Autores:* E. Junquera, A. Pasero y E. Aicart
Título: Electrochemical study of the chelation of Cu^{+2} cation by 18-crown-6-ether and hydroxybenzoic acids in aqueous solution.
Ref. revista / Libro: J. SOLUTION CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 30 *Páginas, inicial:* 497 *final:* 508 *Fecha:* 2001
-
- 72.- *Autores:* E. Junquera, M. Ruiz, S. López y E. Aicart
Título: A technique and a method for the continuous, simultaneous and automatic measurement of density and speed of sound in pure liquids and solutions.
Ref. revista / Libro: REVIEW OF SCIENTIFIC INSTRUMENTS
Clave: A *Volumen:* 73 *Páginas, inicial:* 416 *final:* 421 *Fecha:* 2002
-
- 73.- *Autores:* E. Junquera, D. Olmos y E. Aicart
Título: Carbohydrate-water interactions of p-nitrophenylglycosides in aqueous solution. Ultrasonic and densitometric studies.
Ref. revista / Libro: PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS (PCCP)
Clave: A *Volumen:* 4 *Páginas, inicial:* 352 *final:* 357 *Fecha:* 2002
-
- 74.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart
Título: Mixed micellization of dodecylethyldimethylammonium bromide and dodecyltrimethylammonium bromide in aqueous solution.
Ref. revista / Libro: LANGMUIR
Clave: A *Volumen:* 18 *Páginas, inicial:* 9250 *final:* 9258 *Fecha:* 2002
-
- 75.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart
Título: Physical methods for the determination of stability constants.
Ref. revista / Libro: ENCYCLOPEDIA OF SURFACE AND COLLOID SCIENCE
ISBN: 0-8247-0633-1
Editorial: Marcel Dekker, Inc., Nueva York, USA.
Clave: CL *Volumen:* 4 *Páginas, inicial:* 4090 *final:* 4104 *Fecha:* 2002
-
- 76.- *Autores:* E. Aicart y E. Junquera
Título: Molecular encapsulation by cyclodextrins
Ref. revista / Libro: MICROCAP MANUAL: EUROPEAN THEMATIC NETWORK 1999-2001
Editorial: Brace GmbH, Copenhagen, DK.
Clave: CL *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 1 *final:* 5 *Fecha:* 2002
-

- 77.- *Autores:* E. Aicart y E. Junquera
Título: Molecular encapsulation of caffeine with hydroxypropyl- β -cyclodextrin.
Ref. revista / Libro : MICROCAP MANUAL: EUROPEAN THEMATIC NETWORK 1999-2001
Editorial: Brace GmbH, Copenhagen, DK.
Clave: CL *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 48 *final:* 52 *Fecha:* 2002
-
- 78.- *Autores:* E. Junquera, F. Ortega y E. Aicart
Título: Aggregation process of the mixed ternary system dodecylethyldimethylammonium bromide / dodecylpyridinium chloride / H₂O: an experimental and theoretical approach.
Ref. revista / Libro: LANGMUIR
Clave: A *Volumen:* 19 *Páginas, inicial:* 4923 *final:* 4932 *Fecha:* 2003
-
- 79.- *Autores:* E. Aicart y E. Junquera
Título: Physical methods and experimental techniques for the determination of stability constants.
Ref. revista / Libro: ENCYCLOPEDIA OF SURFACE AND COLLOID SCIENCE
ISBN: 0-8247-0633-1
Editorial: Marcel Dekker, Inc., Nueva York, USA.
Clave: CL *Volumen:* 6 *Páginas, inicial:* 4601 *final:* 4616 *Fecha:* 2003
-
- 80.- *Autores:* E. Aicart y E. Junquera
Título: Mixed surfactant aggregates: experimental and theoretical characterization.
Ref. revista / Libro: ENCYCLOPEDIA OF SURFACE AND COLLOID SCIENCE
ISBN: 0-8247-0633-1
Editorial: Marcel Dekker, Inc., Nueva York, USA.
Clave: CL *Volumen:* 8 *Páginas, inicial:* 6056 *final:* 6073 *Fecha:* 2003
-
- 81.- *Autores:* T. Fergoug, E. Junquera y E. Aicart
Título: Effect of temperature on the encapsulation of the drug tetracaine hydrochloride by β -cyclodextrin and hydroxypropyl- β -cyclodextrin in aqueous medium.
Ref. revista / Libro: J. INCLUSION PHENOMENA AND MACROCYCLIC CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 47 *Páginas, inicial:* 65 *final:* 70 *Fecha:* 2003
-
- 82.- *Autores:* E. Aicart y E. Junquera
Título: Complex formation between purine derivatives and cyclodextrins: a fluorescence spectroscopy study.
Ref. revista / Libro: J. INCLUSION PHENOMENA AND MACROCYCLIC CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 47 *Páginas, inicial:* 161 *final:* 165 *Fecha:* 2003
-
- 83.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart
Título: Modelización de sistemas micelares mixtos de tensioactivos catiónicos.
Ref. revista / Libro: COLOIDES e INTERFASES. ISBN: 84-8158-242-5
Editorial: Universidad de Vigo
Clave: CL *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 135 *final:* 140 *Fecha:* 2003
-
- 84.- *Autores:* A. Rodríguez, E. Junquera, P. del Burgo y E. Aicart
Título: Caracterización del proceso de micelización mixta del bromuro de dodeciltrimetilamonio y el hidrocloreuro de amitriptilina en medio acuoso.
Ref. revista / Libro: COLOIDES e INTERFASES. ISBN: 84-8158-242-5
Editorial: Universidad de Vigo
Clave: CL *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 357 *final:* 360 *Fecha:* 2003
-
- 85.- *Autores:* A. Rodríguez-Pulido, P. del Burgo, E. Junquera y E. Aicart
Título: Conductometric and spectrofluorimetric characterization of the mixed micelles constituted by dodecyltrimethylammonium bromide and a tricyclic antidepressant drug in aqueous solution.

Ref. revista / Libro: J. COLLOID INTERFACE SCIENCE
Clave: A *Volumen:* 269 *Páginas, inicial:* 476 *final:* 483 *Fecha:* 2004

86.- *Autores:* P. del Burgo, E. Junquera y E. Aicart

Título: Mixed micellization of a nonionic-cationic surfactant system constituted by n-octyl- β -D-glucopyranoside/dodecyltrimethylammonium bromide/H₂O. An electrochemical, thermodynamic, and spectroscopic study.

Ref. revista / Libro: LANGMUIR

Clave: A *Volumen:* 20 *Páginas, inicial:* 1587 *final:* 1596 *Fecha:* 2004

87.- *Autores:* T. Fergoug, D. Bendedouche y E. Aicart

Título: Characterization of the 1-heptodecafluorodecyl-pyridinium iodide in solution. Partial phase diagram and micellar properties from conductivity and surface tension.

Ref. revista / Libro: COLLOIDS AND SURFACES A : PHYS. CHEM. ASPECTS

Clave: A *Volumen:* 237 *Páginas, inicial:* 95 *final:* 103 *Fecha:* 2004

88.- *Autores:* A. Lainez, P. del Burgo, E. Junquera y E. Aicart

Título: Mixed micelles formed by n-octyl- β -D-glucopyranoside and tetradecyltrimethylammonium bromide in aqueous media.

Ref. revista / Libro: LANGMUIR

Clave: A *Volumen:* 20 *Páginas, inicial:* 5745 *final:* 5752 *Fecha:* 2004

89.- *Autores:* E. Junquera, R. Arranz y E. Aicart

Título: Mixed vesicle formation on a ternary surfactant system: didodecyldimethylammonium bromide/dodecylethyldimethylammonium bromide/water.

Ref. revista / Libro: LANGMUIR

Clave: A *Volumen:* 20 *Páginas, inicial:* 6619 *final:* 6625 *Fecha:* 2004

90.- *Autores:* E. Junquera, P. del Burgo, R. Arranz, O. Llorca y E. Aicart

Título: Aggregation phenomena on the ternary ionic-nonionic surfactant system: didodecyldimethylammonium bromide/ octyl- β -D-glucopyranoside/water. Mixed micro-aggregates, vesicles and micelles.

Ref. revista / Libro: LANGMUIR

Clave: A *Volumen:* 21 *Páginas, inicial:* 1795 *final:* 1801 *Fecha:* 2005

91.- *Autores:* E. Junquera, P. del Burgo y E. Aicart

Título: Caracterización de sistemas complejos que forman agregados mixtos: Bromuro de didodecildimetilamonio y tensioactivos catiónico o no iónico en medio acuoso.

Ref. revista / Libro: COLOIDES E INTERFASES

Editorial: Universidad de Salamanca

Clave: CL *Volumen:* I *Páginas, inicial:* 409 *final:* 415 *Fecha:* 2005

92.- *Autores:* E. Junquera, P. del Burgo, J. Boskovic y E. Aicart

Título: Self-organization of the ternary didecyldimethylammonium bromide/octyl- β -D-glucopyranoside/water.

Ref. revista / Libro: LANGMUIR

Clave: A *Volumen:* 21 *Páginas, inicial:* 7143 *final:* 7152 *Fecha:* 2005

93.- *Autores:* E. Aicart, P. del Burgo, O. Llorca y E. Junquera

Título: Electrochemical, microscopic and spectroscopic characterization of pre-vesicle nanostructures and vesicles on mixed cationic-cationic surfactant systems.

Ref. revista / Libro: LANGMUIR

Clave: A *Volumen:* 22 *Páginas, inicial:* 4027 *final:* 4036 *Fecha:* 2006

94.- *Autores:* P. del Burgo, E. Aicart y E. Junquera

- Título:* Spectrofluorimetric characterization of mixed nanoaggregates comprising a double-chain cationic surfactant and a cationic or non-ionic single-chain surfactant.
Ref. revista / Libro: APPLIED SPECTROSCOPY
Clave: A *Volumen:* 60 *Páginas, inicial:* 1307 *final:* 1314 *Fecha:* 2006
-
- 95.- *Autores:* P. del Burgo, E. Aicart, O. Llorca y E. Junquera
Título: Cationic prevesicle and vesicle nanoaggregates: An experimental and theoretical study.
Ref. revista / Libro: J. PHYSICAL CHEMISTRY B
Clave: A *Volumen:* 110 *Páginas, inicial:* 23524 *final:* 23539 *Fecha:* 2006
-
- 96.- *Autores:* P. del Burgo, E. Aicart y E. Junquera
Título: Mixed vesicles and mixed micelles of the cationic-cationic surfactant system: Didecyldimethylammonium bromide/dodecylethyldimethylammonium bromide/water.
Ref. revista / Libro: COLLOIDS AND SURFACES A : PHYS. CHEM. ASPECTS
Clave: A *Volumen:* 292 *Páginas, inicial:* 165 *final:* 172 *Fecha:* 2007
-
- 97.- *Autores:* J. L. Rodríguez, M. B. Sierra, P.V. Messina, M. M. Morini, P. C. Schulz, P. del Burgo, E. Junquera, A. Rodríguez-Pulido y E. Aicart
Título: Surface and bulk properties of the aqueous decytrimethylammonium bromide-hexadecyltrimethylammonium bromide mixed system.
Ref. revista / Libro: J. COLLOID INTERFACE SCIENCE
Clave: A *Volumen:* 314 *Páginas, inicial:* 699 *final:* 706 *Fecha:* 2007
-
- 98.- *Autores:* M. B. Sierra, M. M. Morini, P. C. Schulz, E. Junquera y E. Aicart
Título: The effect of double bonds in the formation of mixed micelles.
Ref. revista / Libro: J. PHYSICAL CHEMISTRY B
Clave: A *Volumen:* 111 *Páginas, inicial:* 11692 *final:* 11699 *Fecha:* 2007
-
- 99.- *Autores:* E. Lorente, A. Rodríguez-Pulido, E. Aicart y E. Junquera
Título: Non-ionic and cationic micelle nanostructures as drug solubilization vehicles. Spectrofluorimetric and electrochemical studies.
Ref. revista / Libro: COLLOID AND POLYMER SCIENCE
Clave: A *Volumen:* 285 *Páginas, inicial:* 1321 *final:* 1329 *Fecha:* 2007
-
- 100.- *Autores:* J. Cano, A. Rodríguez-Pulido, E. Aicart y E. Junquera
Título: Temperature effect on the complex formation between tricyclic antidepressant drugs (amitriptyline or imipramine) and hydroxypropyl- β -cyclodextrin in water.
Ref. revista / Libro: J. INCLUSION PHENOMENA AND MACROCYCLIC CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 59 *Páginas, inicial:* 279 *final:* 285 *Fecha:* 2007
-
- 101.- *Autores:* A. Rodríguez-Pulido, E. Aicart, O. Llorca y E. Junquera
Título: Compactation process of calf thymus DNA by mixed cationic-zwitterionic liposomes. A physicochemical study.
Ref. revista / Libro: J. PHYSICAL CHEMISTRY B
Clave: A *Volumen:* 112 *Páginas, inicial:* 2187 *final:* 2197 *Fecha:* 2008
-
- 102.- *Autores:* A. Rodríguez-Pulido, F. Ortega, O. Llorca, E. Aicart y E. Junquera
Título: A physicochemical characterization of the interaction between DC-CHOL/DOPE cationic liposomes and DNA.
Ref. revista / Libro: J. PHYSICAL CHEMISTRY B
Clave: A *Volumen:* 112 *Páginas, inicial:* 12555 *final:* 12565 *Fecha:* 2008

-
- 103.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart
Título: Self-organization of the ternary dialkyldimethylammonium bromide/OBG/water systems. Mixed nanoaggregates, vesicles and micelles.
Ref. revista / Libro: SUGAR-BASED SURFACTANTS: FUNDAMENTALS AND APPLICATIONS
ISBN: 978-1-4200-5166-7
Editorial: CRC Taylor & Francis, Boca Ratón, USA
Clave: CL *Volumen:* Chapter 13 *Páginas, inicial:* 501 *final:* 545 *Fecha:* 2009
-
- 104.- *Autores:* A. Rodríguez-Pulido, E. Aicart y E. Junquera
Título: Electrochemical and spectroscopic study of octadecyltrimethylammonium bromide cationic micelles/DNA surfoplexes.
Ref. revista/ Libro: LANGMUIR
Clave: A *Volumen:* 25 *Páginas, inicial:* 4402 *final:* 4411 *Fecha:* 2009
-
- 105.- *Autores:* A. Rodríguez-Pulido, O. Llorca, C. Rodríguez, E. Aicart, A. Martín-Molina y E. Junquera
Título: Influence of the type of helper lipid on the formation process of cationic dioctadecyldimethylammonium bromide/DNA lipoplexes. An experimental and theoretical approach.
Ref. revista / Libro: J. PHYSICAL CHEMISTRY B
Clave: A *Volumen:* 113 *Páginas, inicial:* 15648 *final:* 15661 *Fecha:* 2009
-
- 106.- *Autores:* M. B. Sierra, J. L. Rodríguez, R. M. Minardi, M. M. Moroni, E. Junquera, E. Aicart y P. C. Schulz
Título: The low concentration aggregation of sodium oleate-sodium linoleate in aqueous mixtures.
Ref. revista: COLLOID AND POLYMER SCIENCE
Clave: A *Volumen:* 288 *Páginas, inicial:* 631 *final:* 641 *Fecha:* 2010
-
- 107.- *Autores:* E. Junquera, A. Casado, A. Rodríguez-Pulido, M. Muñoz-Úbeda y E. Aicart
Título: Experimental and theoretical approach to the sodium decanoate –dodecanoate mixed surfactant system in aqueous solution.
Ref. revista: LANGMUIR
Clave: A *Volumen:* 26 *Páginas, inicial:* 9378 *final:* 9385 *Fecha:* 2010
-
- 108.- *Autores:* D. Alonso, H. Vázquez-Villa, A. M. Gamo, M. F. Martínez-Esperón, M. Tortosa, A. Viso, R. Fernández-Pradilla, E. Junquera, E. Aicart, M. Martín-Fontecha, B. Benhamú, M. L. López-Rodríguez y S. Ortega-Gutiérrez
Título: Development of fluorescent ligands for the human 5-HT_{1A} receptor.
Ref. revista: ACS MEDICINAL CHEMISTRY LET.
Clave: A *Volumen:* 1 *Páginas, inicial:* 249 *final:* 253 *Fecha:* 2010
-
- 109.- *Autores:* H. Vázquez-Villa, J. A. González-Vera, B. Benhamú, A. Viso, R. Fernández-Pradilla, E. Junquera, E. Aicart, M. L. López-Rodríguez y S. Ortega-Gutiérrez
Título: Development of molecular probes for the human 5-HT₆ receptor.
Ref. revista: J. MEDICINAL CHEMISTRY
Clave: A *Volumen:* 53 *Páginas, inicial:* 7095 *final:* 7106 *Fecha:* 2010
-
- 110.- *Autores:* M. Muñoz-Úbeda, A. Rodríguez-Pulido, A. Nogales, A. Martín-Molina, E. Aicart y E. Junquera
Título: Effect of lipid composition on the structure and theoretical phase diagrams of DC-Chol/DOPE-DNA Lipoplexes.
Ref. revista: BIOMACROMOLECULES
Clave: A *Volumen:* 11 *Páginas, inicial:* 3332 *final:* 3340 *Fecha:* 2010

-
- 111.- *Autores:* M. Muñoz-Úbeda, A. Rodríguez-Pulido, A. Nogales, O. Llorca, M. Quesada-Pérez, A. Martín-Molina, E. Aicart y E. Junquera
Título: Gene vectors based on DOEPC/DOPE mixed cationic liposomes: A physicochemical study.
Ref. revista: SOFT MATTER
Clave: A *Volumen:* 7 *Páginas, inicial:* 5991 *final:* 6004 *Fecha:* 2011
-
- 112.- *Autores:* M. Muñoz-Úbeda, S. K. Misra, A. L. Barrán-Berdón, C. Aicart-Ramos, M. B. Sierra, J. Biswas, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart
Título: Why is less cationic lipid required to prepare lipoplexes from plasmid DNA than linear DNA in gene therapy?
Ref. revista: J. AMER. CHEM. SOC.
Clave: A *Volumen:* 133 *Páginas, inicial:* 18014 *final:* 18017 *Fecha:* 2011
-
- 113.- *Autores:* A. B. Dávila-Ibañez, V. Salgueirino, V. Martínez-Zorzano, R. Mariño-Fernández, A. García-Lorenzo, M. Maceira-Campos, M. Muñoz-Úbeda, E. Junquera, E. Aicart, J. Rivas, F. J. Rodríguez-Berrocal y J. L. Legido
Título: Magnetic silica nanoparticle cellular uptake and cytotoxicity regulated by electrostatic polyelectrolytes DNA loading at their surface.
Ref. revista: ACS NANO
Clave: A *Volumen:* 6 *Páginas, inicial:* 747 *final:* 759 *Fecha:* 2012
-
- 114.- *Autores:* A. L. Barrán-Berdón, M. Muñoz-Úbeda, C. Aicart-Ramos, L. Pérez, M. R. Infante, P. Castro-Hartmann, A. Martín-Molina, E. Aicart y E. Junquera
Título: Ribbon-type and cluster-type lipoplexes constituted by a chiral lysine based cationic gemini lipid and plasmid DNA.
Ref. revista: SOFT MATTER (*portada de la revista*) DOI: 10.1039/C2SM25711D
Clave: A *Volumen:* 8 *Páginas, inicial:* 7368 *final:* 7380 *Fecha:* 2012
-
- 115.- *Autores:* M. Muñoz-Úbeda, S. K. Misra, A. L. Barrán-Berdón, S. Datta, C. Aicart-Ramos, P. Castro-Hartmann, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart
Título: How does the spacer length of cationic gemini lipids influence the lipoplex formation with plasmid DNA? Physicochemical and biochemical characterizations and their relevance in gene therapy.
Ref. revista: BIOMACROMOLECULES DOI: 10.1021/bm301066w
Clave: A *Volumen:* 13 *Páginas, inicial:* 3926 *final:* 3937 *Fecha:* 2012
-
- 116.- *Autores:* S. K. Misra, M. Muñoz-Úbeda, S. Datta, A. L. Barrán-Berdón, C. Aicart-Ramos, P. Castro-Hartmann, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart
Título: Effects of a delocalizable cation on the headgroup of gemini lipids on the lipoplex-type nanoggregates directly formed from plasmid DNA.
Ref. revista: BIOMACROMOLECULES DOI: 10.1021/bm401079h
Clave: A *Volumen:* 14 *Páginas, inicial:* 3951 *final:* 3963 *Fecha:* 2013
-
- 117.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart
Título: Cationic lipids as transfecting agents of DNA in gene therapy.
Ref. revista: CURRENT TOPICS IN MEDICINAL CHEMISTRY DOI:
Clave: A *Volumen:* in press *Páginas, inicial:* *final:* *Fecha:* 2014
-
- 118.- *Autores:* A. L. Barrán-Berdón, S. K. Misra, S. Datta, M. Muñoz-Úbeda, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart
Título: Cationic gemini lipids containing polyoxyethylene spacers as improved transfecting agents of plasmid DNA in cancer cells.
Ref. revista: J. MATERIALS CHEMISTRY B

Clave: A *Enviado* *Fecha:* 2014

119.- *Autores:* A. L. Barrán-Berdón, K. Singhanía, S. Datta, M. Muñoz-Úbeda, C. Aicart-Ramos, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart

Título: Cationic gemini lipids containing delocalizable charges on the head groups linked with polyoxyethylene spacers: a via to improve transfection of plasmid DNA in gene delivery.

Ref. revista: CHEMISTRY- A EUROPEAN JOURNAL

Clave: A *En preparación,* *Fecha:* 2014

120.- *Autores:* M. Martínez-Negro, K. Singhanía, A. L. Barrán-Berdón, S. Datta, P. Kondaiah, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart

Título: Nanotherapeutic agents based on cationic gemini lipids for siRNA gene delivery

Ref. revista: J. MATERIALS CHEMISTRY B

Clave: A *En preparación,* *Fecha:* 2014

Otras Publicaciones

Monografías

1.- *Autores:* E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña

Título: Determinación y aplicaciones de la velocidad del sonido en líquidos puros y mezclas.

Ref. revista / Libro: TERMODINAMICA EXPERIMENTAL

Clave: CL *Volumen:* 3 *Páginas, inicial:* 185 *final:* 201 *Fecha:* 1988

Participación en contratos de I+D de especial relevancia con Empresas y/o Administraciones
(nacionales y/o internacionales)

Título del contrato/proyecto: Determinación del Potencial Zeta en disoluciones de agua de mar.

Tipo de contrato: Contrato de muestras según Art. 83 de la LOU

Empresa/Administración financiadora: VEOLIA WATER Solutions & Technologies

Entidades participantes: UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID y VEOLIA WATER

Duración, desde: Junio de 2006 *hasta:* Septiembre de 2006

Investigador responsable: EMILIO AICART SOSPEDRA

Número de investigadores participantes: 3

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 88.- € por muestra (+IVA)

Título del contrato/proyecto: Determinación del Potencial Zeta en disoluciones de agua de mar.

Tipo de contrato: Contrato de muestras según Art. 83 de la LOU

Empresa/Administración financiadora: VEOLIA WATER Solutions & Technologies

Entidades participantes: UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID y VEOLIA WATER

Duración, desde: Junio de 2008 *hasta:* Junio de 2009

Investigador responsable: ELENA JUNQUERA GONZALEZ

Número de investigadores participantes: 4

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 100.- € por muestra (+IVA)

Título del contrato/proyecto: Generación y caracterización de nanopartículas lipídicas.

Tipo de contrato: Contrato de muestras según Art. 83 de la LOU

Empresa/Administración financiadora: BIODAN Sciences

Entidades participantes: UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID y BIODAN Sciences

Duración, desde: Abril de 2013 *hasta:* Julio de 2013

Investigador responsable: ELENA JUNQUERA GONZALEZ y EMILIO AICART SOSPEDRA

Número de investigadores participantes: 3

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO: 12222,22.- (+IVA)

Patentes y Modelos de Utilidad

Inventores (p.o. de firma): E. Junquera, M. Ruiz, S. López y E. Aicart

Título: Técnica y un método para la medida continua, simultánea y automática de la velocidad del sonido y la densidad en líquidos y disoluciones.

N. de solicitud: P200101592 *País de prioridad:* España

Fecha de prioridad: 6-7-2001

Fecha de concesión: 15-6-2006

Entidad titular: UCM / UPM

Países a los que se ha extendido:

Empresa/s que la están explotando:

Estancias en Centros extranjeros
(estancias continuadas superiores a un mes)

CLAVE: D = doctorado, P = postdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras (especificar).

- 1.- *Centro:* National Research Council of Canada
Localidad: OTTAWA *País:* Canadá *Fecha:* 1982 *Duración (semanas):* 15
Tema: Velocidad del sonido en líquidos mediante una técnica de pulsos
Clave: P
-
- 2.- *Centro:* Universidad Nacional Autónoma de México
Localidad: MEXICO, D.F. *País:* México *Fecha:* 1987 *Duración (semanas):* 8
Tema: Estructura de disoluciones líquidas .
Clave: I, C
-
- 3.- *Centro:* University of Saskatchewan
Localidad: SASKATOON *País:* Canadá *Fecha:* 1989 *Duración (semanas):* 26
Tema: Absorción ultrasónica en medios micelares mixtos.
Clave: I, C
-
- 4.- *Centro:* Universidad Nacional del Sur
Localidad: BAHÍA BLANCA *País:* Argentina *Fecha:* 2006 *Duración (semanas):* 3
Tema: Sistemas coloidales de tensioactivos mezclados: micelas, vesículas y liposomas.
Clave: I
-
- 5.- *Centro:* Universidad de California Santa Barbara
Localidad: SANTA BARBARA *País:* USA *Fecha:* 2008 *Duración (semanas):* 26
Tema: Desarrollo de materiales híbridos miniaturizados a partir de moléculas biológicas autoorganizadas en superficies estructuradas.
Clave: I
-
- 6.- *Centro:* Indian Institute of Science
Localidad: BANGALORE *País:* India *Fecha:* 2010 *Duración (semanas):* 3
Tema: Compactación de DNA/siRNA con nuevos lípidos gemini: Transfección de formulaciones en terapia génica
Clave: I
-
- 7.- *Centro:* Indian Institute of Science
Localidad: BANGALORE *País:* India *Fecha:* 2011 *Duración (semanas):* 3
Tema: Compactación de DNA/siRNA con nuevos lípidos gemini: Transfección de formulaciones en terapia génica
Clave: I
-
- 8.- *Centro:* Indian Institute of Science
Localidad: BANGALORE *País:* India *Fecha:* 2013 *Duración (semanas):* 4

Tema: Compactación de DNA/siRNA con nuevos lípidos gemini: Transfección de formulaciones en terapia génica

Clave: I

Contribuciones a Congresos

- 1.- *Autores:* E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña
Título: Compresibilidad isotérmica de ciclohexano con n-hexano, con n-octano y con n-nonano.
Tipo de participación: Conferencia
Congreso: 75 Aniversario Real Soc. Esp. Física y Química
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación 14-19
Lugar de celebración: Madrid *Fecha:* 1978 *Carácter:* Internacional
-
- 2.- *Autores:* E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña
Título: Compresibilidad isotérmica de ciclohexano + benceno y + tolueno, y benceno+ tolueno a 298.15, 308.15, 318.15 y 333.15 K.
Tipo de participación: Conferencia
Congreso: I Conferencia Internacional de Termodinámica de Disolución de No-electrolitos
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación C13
Lugar de celebración: Santiago de Compostela (España) *Fecha:* 1979 *Carácter:* Internacional
-
- 3.- *Autores:* E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña
Título: Compresibilidades y capacidades caloríficas de benceno + ciclohexano y + tolueno.
Tipo de participación: Conferencia
Congreso: 3º Encontro Nacional da Sociedade Portuguesa de Química
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación 9-3.2
Lugar de celebración: Coimbra (Portugal) *Fecha:* 1980 *Carácter:* Internacional
-
- 4.- *Autores:* E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña
Título: Compresibilidad isotérmica de ciclohexano + n-decano, + n-dodecano, + n-tridecano, + n-tetradecano y + n-pentadecano.
Tipo de participación: Conferencia
Congreso: XVIII Reunión Bienal de la Real Soc. Esp. Física y Química
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación 13-21
Lugar de celebración: Burgos (España) *Fecha:* 1980 *Carácter:* Nacional
-
- 5.- *Autores:* E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña
Título: Teoría de Patterson (6-12) para mezclas de ciclohexano con n-alcanos.
Tipo de participación: Póster
Congreso: 4º Encontro Anual da Sociedade Portuguesa de Química
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación PC31
Lugar de celebración: Lisboa (Portugal) *Fecha:* 1981 *Carácter:* Internacional
-
- 6.- *Autores:* J. Garbajosa, G. Tardajos, E. Aicart y M. Díaz Peña
Título: Compresibilidad isotérmica de tolueno + n-hexano y + n-octano. Aplicación de la teoría PFP.
Tipo de participación: Póster
Congreso: II International Conference on Thermodynamics of Solutions of Non-electrolytes
Publicación: Libro de resúmenes, Symposium on transport properties of fluids, A17
Lugar de celebración: Lisboa (Portugal) *Fecha:* 1982 *Carácter:* Internacional
-
- 7.- *Autores:* M. L. Rey, E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña
Título: Termodinámica de metilciclohexano + tolueno y + ciclohexano a partir de medidas de compresibilidad isotérmica.
Tipo de participación: Conferencia
Congreso: Congreso Iberoamericano de Ciencias Químicas, 50 Aniv. Soc. Química Perú
Publicación: Libro de resúmenes, Pag. 18

Lugar de celebración: Lima (Perú) *Fecha:* 1983 *Carácter:* Internacional

8.- *Autores:* A. Lainez, E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña

Título: Predicción de propiedades de exceso de bromobutano + benceno, + tolueno y + etilbenceno.

Tipo de participación: Póster

Congreso: 6º Encontro Anual da Sociedade Portuguesa de Química

Publicación: Libro de Resúmenes, Comunicación PA19

Lugar de celebración: Aveiro (Portugal) *Fecha:* 1983 *Carácter:* Internacional

9.- *Autores:* E. Aicart, M. K. Kumaran, C. J. Halpin y G. C. Benson

Título: Ultrasonic speeds and isentropic compressibilities of n-heptane with hexane isomers at 298.15 K.

Tipo de participación: Póster

Congreso: 6º Encontro Anual da Sociedade Portuguesa de Química

Publicación: Libro de Resúmenes, Comunicación PA1

Lugar de celebración: Aveiro (Portugal) *Fecha:* 1983 *Carácter:* Internacional

10.- *Autores:* G. Tardajos, E. Aicart y M. Díaz Peña

Título: Thermal expansion coefficient of benzene + n-decane, and + n-tetradecane mixtures at various temperatures.

Tipo de participación: Póster

Congreso: 3rd International Conference on Thermodynamics of Solutions of Non Electrolytes

Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación 69

Lugar de celebración: Clermont Ferrand (Francia) *Fecha:* 1984 *Carácter:* Internacional

11.- *Autores:* G. Tardajos, M. Díaz Peña y E. Aicart

Título: Termodinámica de líquidos a partir de la velocidad del sonido a 298.15 K.

Tipo de participación: Póster

Congreso: XX Reunión Bienal de la Real Soc. Esp. Química

Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación 21-16

Lugar de celebración: Castellón (España) *Fecha:* 1984 *Carácter:* Nacional

12.- *Autores:* G. Tardajos, E. Aicart, M. Costas y D. Patterson

Título: Liquid structure and second-order mixing functions for benzene, toluene and p-xylene+n-alkanes.

Tipo de participación: Conferencia

Congreso: 9th IUPAC Conference on Thermodynamics

Publicación: Libro de resúmenes, Paper 1.28

Lugar de celebración: Lisboa (Portugal) *Fecha:* 1986 *Carácter:* Internacional

13.- *Autores:* G. Tardajos, M. Díaz Peña y E. Aicart

Título: A pulse-echo-overlap technique to measure the speed of sound in liquids.

Tipo de participación: Conferencia

Congreso: 9th IUPAC Conference on Thermodynamics

Publicación: Libro de resúmenes, Paper 7.8

Lugar de celebración: Lisboa (Portugal) *Fecha:* 1986 *Carácter:* Internacional

14.- *Autores:* I. Gamboa, G. Tardajos, M. Díaz Peña y E. Aicart

Título: Termodinámica de tolueno + n-decano y + n-dodecano a varias temperaturas.

Tipo de participación: Póster

Congreso: XXI Reunión Bienal de la Real Soc. Esp. Química

Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación 30-006-C

Lugar de celebración: Santiago de Compostela (España) *Fecha:* 1986 *Carácter:* Nacional

- 15.- *Autores:* A. Domínguez, E. Aicart, M. Díaz Peña y G. Tardajos
Título: Expansibilidad isobática y compresibilidad isotérmica de etilbenceno + n-hexano, + n-octano y + n-nonano.
Tipo de participación: Póster
Congreso: XXI Reunión Bienal de la Real Soc. Esp. Química
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación 30-006-C
Lugar de celebración: Santiago de Compostela (España) *Fecha:* 1986 *Carácter:* Nacional
-
- 16.- *Autores:* A. Domínguez, G. Tardajos, M. Díaz Peña y E. Aicart
Título: Thermodynamic properties of ethylbenzene with n-alkanes at various temperatures.
Tipo de participación: Póster
Congreso: 8th International Symposium on Solute-Solute-Solvent Interactions
Publicación: Libro de resúmenes, Paper P2.40
Lugar de celebración: Regensburg (Alemania) *Fecha:* 1987 *Carácter:* Internacional
-
- 17.- *Autores:* E. Aicart, G. Tardajos y M. Díaz Peña
Título: Determinación y aplicaciones de la velocidad del sonido en líquidos puros y mezclas.
Tipo de participación: Conferencia
Congreso: III Coloquio de Termodinámica Experimental
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación 10
Lugar de celebración: México, D.F. *Fecha:* 1987 *Carácter:* Internacional
-
- 18.- *Autores:* S. Pérez-Casas, E. Aicart, L. M. Trejo y M. Costas
Título: Excess heat capacities and excess volumes of chlorobenzene with linear and branched alkanes.
Tipo de participación: Póster
Congreso: 6th Int. Conference. Mixtures of Non-electrolytes and Intermolecular Interactions
Publicación: Libro de resúmenes, Paper Po/3
Lugar de celebración: Merseburg (Alemania) *Fecha:* 1988 *Carácter:* Internacional
-
- 19.- *Autores:* A. D. Matilla, G. Tardajos, M. Díaz Peña y E. Aicart
Título: Thermodynamic properties of 1-chlorobutane + n-alkanes at various temperatures.
Tipo de participación: Póster
Congreso: 6th Int. Conference. Mixtures of Non-electrolytes and Intermolecular Interactions
Publicación: Libro de resúmenes, Paper Po/4
Lugar de celebración: Merseburg (Alemania) *Fecha:* 1988 *Carácter:* Internacional
-
- 20.- *Autores:* E. Junquera, G. Tardajos y E. Aicart
Título: Speed of sound and isentropic compressibility of 1-chlorobutane + an n-alkane.
Tipo de participación: Póster
Congreso: 10th IUPAC Conference on Chemical Thermodynamics
Publicación: Libro de resúmenes, Paper I-15
Lugar de celebración: Praga (Checoslovaquia) *Fecha:* 1988 *Carácter:* Internacional
-
- 21.- *Autores:* A. D. Matilla, G. Tardajos, M. Díaz Peña y E. Aicart
Título: Second order thermodynamic properties of ethylbenzene + n-alkanes at various temperatures.
Tipo de participación: Póster
Congreso: 10th IUPAC Conference on Chemical Thermodynamics
Publicación: Libro de resúmenes, Paper B-22
Lugar de celebración: Praga (Checoslovaquia) *Fecha:* 1988 *Carácter:* Internacional
-
- 22.- *Autores:* E. Aicart, M. Costas, E. Junquera, A. D. Matilla y G. Tardajos
Título: Excess speed of sound and excess isentropic compressibility of (1,4-dioxane + an n-alkane).
Tipo de participación: Póster
Congreso: Ultrasonics International 89

Publicación: Libro de resúmenes, Pag. 86

Lugar de celebración: Madrid (España)

Fecha: 1989 *Carácter:* Internacional

23.- *Autores:* A. D. Matilla, E. Junquera, G. Tardajos y E. Aicart

Título: Second-order mixing functions for chlorobenzene with linear alkanes.

Tipo de participación: Póster

Congreso: 4th International Conference on Thermodynamics of Solution of Non-electrolytes.

Publicación: Libro de resúmenes, Paper P-I.3

Lugar de celebración: Santiago de Compostela (España) *Fecha:* 1989 *Carácter:* Internacional

24.- *Autores:* E. Aicart, D. J. Jobe y R. E. Verrall

Título: Ultrasonic absorption studies of ternary systems of decyltrimethylammonium bromide, water and alcohols.

Tipo de participación: Conferencia

Congreso: 73rd Canadian Chemical Conference and Exhibition

Publicación: Libro de resúmenes, Paper 15-59

Lugar de celebración: Halifax (Canada) *Fecha:* 1990 *Carácter:* Internacional

25.- *Autores:* E. Junquera, E. Aicart, G. Tardajos, D. J. Jobe y R. E. Verrall

Título: Inclusion complexes of decyltrimethylammonium bromide and β -cyclodextrin in water.

Tipo de participación: Póster

Congreso: 7th International Conference on surface and Colloid Science

Publicación: Libro de resúmenes, Paper C1/P-27

Lugar de celebración: Compiègne (Francia) *Fecha:* 1991 *Carácter:* Internacional

26.- *Autores:* E. Aicart, D. J. Jobe, B. Skalski y R. E. Verrall

Título: Ultrasonic relaxation studies of ternary microemulsions formed from alcohol, water and decyltrimethylammonium bromide.

Tipo de participación: Conferencia

Congreso: 74rd Canadian Chemical Conference and Exhibition

Publicación: Libro de resúmenes, Paper 5-48

Lugar de celebración: Vancouver (Canada) *Fecha:* 1992 *Carácter:* Internacional

27.- *Autores:* D. J. Jobe, R. E. Verrall, E. Junquera, L. Peña, J. González-Benito y E. Aicart

Título: Caracterización de los complejos de inclusión ciclodextrina/surfactante en disolución acuosa.

Tipo de participación: Póster

Congreso: Propiedades, Caracterización y Aplicaciones de los Sistemas Coloidales.

Publicación: Libro de memorias, Pag. 397

Lugar de celebración: Alcalá de Henares (España) *Fecha:* 1993 *Carácter:* Nacional

28.- *Autores:* E. Aicart, E. Junquera, B. Skalski, D. J. Jobe y R. E. Verrall

Título: Estudio de sistemas micelares en presencia de alcoholes mediante medidas de conductividad, relajación ultrasónica y fluorescencia inducida por láser.

Tipo de participación: Conferencia

Congreso: Propiedades, caracterización y aplicaciones de los sistemas coloidales.

Publicación: Libro de memorias, Pag. 135

Lugar de celebración: Alcalá de Henares (España) *Fecha:* 1993 *Carácter:* Nacional

29.- *Autores:* J. González-Benito, E. Junquera, L. Peña y E. Aicart

Título: β -Cyclodextrin or 2,6-di-O-methyl- β -cyclodextrin and dodecyltrimethylammonium bromide in aqueous solution.

Tipo de participación: Póster

Congreso: 23rd International Conference on Solution Chemistry
Publicación: Libro de resúmenes, Paper PO43
Lugar de celebración: Leicester (Reino Unido) Fecha: 1993 Carácter: Internacional

30.- Autores: E. Junquera, L. Peña y E. Aicart

Título: Influence of temperature on the micellization of sodium dodecylsulfate in water.

Tipo de participación: Póster

Congreso: 23rd International Conference on Solution Chemistry

Publicación: Libro de resúmenes, Paper PO44

Lugar de celebración: Leicester (Reino Unido) Fecha: 1993 Carácter: Internacional

31.- Autores: E. Aicart, H. V. Tra, L. Andreoli-Ball y D. Patterson

Título: S-Shape composition dependence of excess thermodynamic quantities of cyclohexane + globular alkanes.

Tipo de participación: Póster

Congreso: 13th IUPAC Conference on Chemical Thermodynamics

Publicación: Libro de resúmenes, Paper 2/P-27

Lugar de celebración: Clermont-Ferrand (Francia) Fecha: 1994 Carácter: Internacional

32.- Autores: E. Junquera, L. Peña y E. Aicart

Título: Microencapsulación de bromuro de dodeciltrimetilamonio con ciclodextrinas y su influencia en la micelización del tensoagente con una técnica conductimétrica automatizada.

Tipo de participación: Conferencia

Congreso: XXV Reunión Bienal de la R. S. E. de Química

Publicación: Libro de resúmenes, Simposio 6, Resumen 6-O-1

Lugar de celebración: Vitoria (España) Fecha: 1994 Carácter: Nacional

33.- Autores: R. E. Verrall, D. J. Jobe y E. Aicart

Título: Ultrasonic relaxation study of fast exchange processes in mixed micelle systems of alcohol-decyltrimethylammonium bromide-water.

Tipo de participación: Conferencia

Congreso: 42nd Yamada Conference on Structure, Fluctuation and Relaxation in Solutions.

Publicación: Libro de resúmenes, Paper C1-07

Lugar de celebración: Nagoya (Japón) Fecha: 1994 Carácter: Internacional

34.- Autores: E. Junquera, L. Peña y E. Aicart

Título: Determinación de la conductividad electroquímica en mezclas líquidas con una técnica totalmente automatizada.

Tipo de participación: Póster

Congreso: 7^{as} Jornadas de Análisis Instrumental

Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación C-DIN-18

Lugar de celebración: Madrid (España) Fecha: 1995 Carácter: Nacional

35.- Autores: E. Junquera, L. Peña y E. Aicart

Título: Molecular encapsulation of surfactants by cyclodextrins. A conductimetric study.

Tipo de participación: Póster

Congreso: IXth European Colloid and Interface Society Conference

Publicación: Libro de resúmenes, Paper PI-39

Lugar de celebración: Barcelona (España) Fecha: 1995 Carácter: Internacional

36.- Autores: D. Ruiz, E. Junquera, V. García-Baonza y E. Aicart

Título: Molecular encapsulation of salicylic acid by β -cyclodextrin. A potentiometric study.

Tipo de participación: Póster

Congreso: The 8th International Cyclodextrin Symposium

Publicación: Libro de resúmenes, Paper 2-p11
Lugar de celebración: Budapest (Hungria) *Fecha:* 1996 *Carácter:* Internacional

37.- *Autores:* E. Junquera, O. Pastor y E. Aicart

Título: Encapsulation of the salicylic acid/salicylate system by hydroxypropyl- β -cyclodextrin at 298.15 K. A fluorescence enhancement study in aqueous solutions.

Tipo de participación: Póster

Congreso: 1997 Pharmaceutical Applications of Cyclodextrins

Publicación: Libro de resúmenes, Paper 5-46

Lugar de celebración: Lawrence (USA) *Fecha:* 1997 *Carácter:* Internacional

38.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart

Título: A potentiometric study of the encapsulation of ketoprofen by hydroxypropyl- β -cyclodextrin. Temperature, solvent and salt effects.

Tipo de participación: Póster

Congreso: 1997 Pharmaceutical Applications of Cyclodextrins

Publicación: Libro de resúmenes, Paper 5-47

Lugar de celebración: Lawrence (USA) *Fecha:* 1997 *Carácter:* Internacional

39.- *Autores:* E. Junquera, O. Pastor y E. Aicart

Título: Aggregation number of the n-octyl- β -glucopyranoside micelles in the presence and absence of salt at 298.15 K by a steady state fluorescence method.

Tipo de participación: Póster

Congreso: 7th European Conference on Spectroscopy of Biological Molecules

Publicación: Libro de resúmenes, Pag. 331

Lugar de celebración: San Lorenzo del Escorial (España) *Fecha:* 1997 *Carácter:* Internacional

40.- *Autores:* E. Junquera, O. Pastor y E. Aicart

Título: Encapsulation of the salicylic acid/salicylate system by hydroxypropyl- β -cyclodextrin at 25 °C. A fluorescence enhancement in aqueous solutions.

Tipo de participación: Póster

Congreso: Spectroscopy of Biological Molecules: Modern Trends

Publicación: Libro de resúmenes, Pag. 397

Lugar de celebración: San Lorenzo del Escorial (España) *Fecha:* 1997 *Carácter:* Internacional

41.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart

Título: Energetic study of the inclusion of the hydroxybenzoic acids in β -CD, DIMEB, or HPBCD in aqueous solution.

Tipo de participación: Póster

Congreso: 9th International Symposium on Cyclodextrins

Publicación: Libro de resúmenes, 7-P-12

Lugar de celebración: Santiago de Compostela (España) *Fecha:* 1998 *Carácter:* Internacional

42.- *Autores:* E. Junquera, M. Martín-Pastor y E. Aicart

Título: Encapsulation of nonsteroidal antiinflammatory drugs by hydroxypropyl- β -cyclodextrin in aqueous solution.

Tipo de participación: Conferencia

Congreso: 9th International Symposium on Cyclodextrins

Publicación: Libro de resúmenes, 3-O-12

Lugar de celebración: Santiago de Compostela (España) *Fecha:* 1998 *Carácter:* Internacional

43.- *Autores:* E. Aicart y E. Junquera

Título: Techniques for the characterization of surfactants, carbohydrates and host:guest systems in aqueous solution.

- Tipo de participación:* Conferencia
Congreso: 1st Minutes of the MICROCAP
Publicación:
Lugar de celebración: Marsella (Francia) *Fecha:* 1999 *Carácter:* Internacional
-
- 44.- *Autores:* N. Martínez, E. Junquera y E. Aicart
Título: Estudio de los complejos de inclusión formados por los ácidos gáltico y gálico con β -ciclodextrina en disolución acuosa.
Tipo de participación: Póster
Congreso: XXVII Reunión Bienal de la R. S. E. Química
Publicación: Libro de resúmenes, S4-C-05
Lugar de celebración: La Laguna (España) *Fecha:* 1999 *Carácter:* Nacional
-
- 45.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart
Título: Microencapsulation of drugs by β -cyclodextrin in water solution.
Tipo de participación: Póster
Congreso: 12th International Symposium on Microencapsulation
Publicación: Libro de resúmenes, 26
Lugar de celebración: Londres (Reino Unido) *Fecha:* 1999 *Carácter:* Internacional
-
- 46.- *Autores:* C. Merino, E. Junquera J. Jiménez-Barbero y E. Aicart
Título: Spectroscopic and thermodynamic studies of the procaine hydrochloride/ β -cyclodextrin/water ternary system.
Tipo de participación: Póster
Congreso: 12th International Symposium on Microencapsulation
Publicación: Libro de resúmenes, 27
Lugar de celebración: Londres (Reino Unido) *Fecha:* 1999 *Carácter:* Internacional
-
- 47.- *Autores:* E. Aicart y E. Junquera
Título: Techniques and characterization for end user applications.
Tipo de participación: Conferencia
Congreso: 1st MICROCAP Workshop, University of London, UK
Lugar de celebración: Londres (Reino Unido) *Fecha:* 1999 *Carácter:* Internacional
-
- 48.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart
Título: Estudio termodinámico y espectroscópico de sistemas ternarios n-octil- β -D-glucopiranosido / sal / agua.
Tipo de participación: Póster
Congreso: 4^a Reunión Grupo de Coloides e Interfases de la Real Soc. Esp. Química
Publicación: Libro de resúmenes, P1
Lugar de celebración: Barcelona (España) *Fecha:* 2000 *Carácter:* Nacional
-
- 49.- *Autores:* E. Aicart y E. Junquera
Título: Molecular encapsulation by cyclodextrins.
Tipo de participación: Conferencia
Congreso: 3rd Minutes of the MICROCAP
Lugar de celebración: París (Francia) *Fecha:* 2000 *Carácter:* Internacional
-
- 50.- *Autores:* E. Aicart y E. Junquera
Título: Molecular encapsulation of caffeine with hydroxypropyl- β -cyclodextrin.
Tipo de participación: Conferencia
Congreso: 3rd Minutes of the MICROCAP
Lugar de celebración: París (Francia) *Fecha:* 2000 *Carácter:* Internacional
-

- 51.- *Autores:* E. Junquera, J. C. Romero y E. Aicart
Título: Association of tricyclic antidepressants with β -cyclodextrin in aqueous solution.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación P-063
Congreso: 13th International Symposium on Microencapsulation
Lugar de celebración: Angers (Francia) *Fecha:* 2001 *Carácter:* Internacional
-
- 52.- *Autores:* E. Junquera, A. Pasero y E. Aicart
Título: Electrochemical study of the chelation of Cu^{2+} cation by 18-crown-6-ether and hydroxybenzoic acids in aqueous solution.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación P-064
Congreso: 13th International Symposium on Microencapsulation
Lugar de celebración: Angers (Francia) *Fecha:* 2001 *Carácter:* Internacional
-
- 53.- *Autores:* E. Junquera, y E. Aicart
Título: Self-aggregation of the tricyclic antidepressants drugs, imipramine, desimipramine and amitriptyline in aqueous solution.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación P-061-A
Congreso: 14th SIS Surfactants in Solution Symposium
Lugar de celebración: Barcelona (España)) *Fecha:* 2002 *Carácter:* Internacional
-
- 54.- *Autores:* E. Aicart y E. Junquera
Título: Mixed micelles of cationic alkylsurfactants.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación P-079-A
Congreso: 14th SIS Surfactants in Solution Symposium
Lugar de celebración: Barcelona (España)) *Fecha:* 2002 *Carácter:* Internacional
-
- 55.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart
Título: Modelización de sistemas micelares mixtos de tensioactivos catiónicos.
Tipo de participación: Conferencia
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación O-22
Congreso: 5^a Reunión Grupo de Coloides e Interfases de la Real Soc. Esp. Química
Lugar de celebración: Vigo (España) *Fecha:* 2003 *Carácter:* Nacional
-
- 56.- *Autores:* A. Rodríguez-Pulido, E. Junquera, P. del Burgo y E. Aicart
Título: Caracterización del proceso de micelización mixta del bromuro de dodeciltrimetilamonio y el hidrocloreuro de amitriptilina en medio acuoso.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación P-47
Congreso: 5^a Reunión Grupo de Coloides e Interfases de la Real Soc. Esp. Química
Lugar de celebración: Vigo (España) *Fecha:* 2003 *Carácter:* Nacional
-
- 57.- *Autores:* E. Junquera, A. Rodríguez-Pulido, P. del Burgo y E. Aicart
Título: Solubilización del Fármaco Antidepresivo Hidrocloreuro de Amitriptilina en Agregados Micelares en Medio Acuoso.
Tipo de participación: Póster (ponente)
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación S4-P6
Congreso: 100 RSEF-RSEQ. XXIX Reunión Bienal de Química
Lugar de celebración: Madrid (España) *Fecha:* 2003 *Carácter:* Internacional
-

- 58.- *Autores:* E. Junquera, P. del Burgo y E. Aicart
Título: Mixed aggregation of the nonionic-ionic ternary system octyl- β -d-glucopyranoside/dodecyltrimethylammonium bromide / H₂O.
Tipo de participación: Póster (ponente)
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación 157-SP
Congreso: 11th International Conference on Surface and Colloid Science
Lugar de celebración: Foz de Iguazú (Brasil) *Fecha:* 2003 *Carácter:* Internacional
-
- 59.- *Autores:* E. Junquera, P. del Burgo y E. Aicart
Título: A theoretical approach for the mixed aggregation of octyl- β -d-glucopyranoside and dodecyltrimethylammonium bromide in aqueous solution.
Tipo de participación: Póster (ponente)
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación 158-SP
Congreso: 11th International Conference on Surface and Colloid Science
Lugar de celebración: Foz de Iguazú (Brasil) *Fecha:* 2003 *Carácter:* Internacional
-
- 60.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart
Título: Mixed vesicles of di-dodecyltrimethylammonium bromide/dodecylethyldimethylammonium bromide in water.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación P1.46
Congreso: 18th Conference of the European Colloid and Interface Society
Lugar de celebración: Almería (Spain) *Fecha:* 2004 *Carácter:* Internacional
-
- 61.- *Autores:* A. Lainez, P. del Burgo, E. Junquera y E. Aicart
Título: Mixed aggregation of the octyl- β -D-glucopyranoside/ tetradecyltrimethylammonium bromide in water.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación P1.47
Congreso: 18th Conference of the European Colloid and Interface Society
Lugar de celebración: Almería (Spain) *Fecha:* 2004 *Carácter:* Internacional
-

- 62.- *Autores:* E. Junquera, P. del Burgo, y E. Aicart
Título: Caracterización de sistemas complejos que forman agregados mixtos: Bromuro de didodecildimetilamonio y tensioactivos catiónicos en medio acuoso.
Tipo de participación: Conferencia
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación S6O01, p. 113
Congreso: VI Reunión del Grupo Especializado de Coloides e Interfases y I Reunión Ibérica de Coloides e Interfases
Lugar de celebración: Salamanca (Spain) *Fecha:* 2005 *Carácter:* Internacional
-
- 63.- *Autores:* E. Lorente, E. Junquera, A. Rodríguez-Pulido y E. Aicart
Título: The solubilization of the local anesthetic drug, tetracaine, in non-ionic and ionic micelles, and in vesicles of several surfactants in water.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación P-08
Congreso: M3 – Molecules, Materials, Medicines
Lugar de celebración: Reykiavik (Islandia) *Fecha:* 2007 *Carácter:* Internacional
-
- 64.- *Autores:* J. Cano, E. Junquera, A. Rodríguez-Pulido y E. Aicart
Título: Molecular encapsulation of tricyclic antidepressant drugs (amitriptyline and imipramine) by hydroxypropyl- β -cyclodextrin in water.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, Comunicación P-09
Congreso: M3 – Molecules, Materials, Medicines
Lugar de celebración: Reykiavik (Islandia) *Fecha:* 2007 *Carácter:* Internacional
-
- 65.- *Autores:* E. Junquera y E. Aicart
Título: Físicoquímica de sistemas coloidales complejos.
Tipo de participación: Comunicación Oral
Congreso: II Jornadas de Transferencia de Tecnología. RED COLINTER
Lugar de celebración: Granada (España) *Fecha:* 2007 *Carácter:* Nacional
-
- 66.- *Autores:* A. Rodríguez-Pulido, E. Junquera y E. Aicart
Título: Electrochemical, microscopic and spectroscopic studies of DODAB/DOPE-DNA and DSTAP/DOPE-DNA lipoplexes.
Tipo de participación: Comunicación Oral
Publicación: Libro de resúmenes, comunicación OC#3.2, p. 30
Congreso: II Reunión Ibérica de Coloides e Interfases y VII Reunión Grupo de Coloides e Interfases de la Real Soc. Esp. Química.
Lugar de celebración: Coimbra (Portugal) *Fecha:* 2007 *Carácter:* Internacional
-
- 67.- *Autores:* A. Rodríguez-Pulido, E. Junquera y E. Aicart
Título: Lipoplejos: compactación de la molécula de ADN mediante liposomas catiónicos
Tipo de participación: Comunicación Oral
Publicación: Libro de resúmenes, comunicación G4-O3, p. 177
Congreso: XXXI Reunión Bienal de Química
Lugar de celebración: Toledo (España) *Fecha:* 2007 *Carácter:* Nacional
-
- 68.- *Autores:* M. B. Sierra, E. Junquera, E. Aicart, P. C. Schulz y M. A. Morini
Título: Estudio de la agregación a baja concentración de una mezcla de oleato de sodio y linoleato de sodio.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, comunicación D07, p. 70
Congreso: XV Congreso Argentino de Físicoquímica y Química Inorgánica
Lugar de celebración: Buenos Aires (Argentina) *Fecha:* 2007 *Carácter:* Nacional
-
- 69.- *Autores:* M. B. Sierra, M.A. Moroni, P. C. Schulz, E. Junquera y E. Aicart

- Título:* El efecto de los dobles enlaces en la formación de micelas mezcladas.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, comunicación D11, p. 71
Congreso: XV Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica
Lugar de celebración: Buenos Aires (Argentina) *Fecha:* 2007 *Carácter:* Nacional
-
- 70.- *Autores:* R. Chicharro, V. I. Dodero, A. Viso, R. Fernández de la Pradilla, N. Lwoff, A.B. García, E. Aicart, E. Junquera, M. Martín-Fontecha, S. Ortega-Gutiérrez, B. Bwnhamú y M. L. López-Rodríguez
Título: Labeling of ligands for the study of serotonin 5-HT_{1A} and 5-HT₆ receptors.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, p. 166
Congreso: XV Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica
Lugar de celebración: San Lorenzo del Escorial (España) *Fecha:* 2007 *Carácter:* Nacional
-
- 71.- *Autores:* M. B. Sierra, M. A. Morini, J. L. Rodríguez, E. Junquera, E. Aicart y P. C. Schulz
Título: Estudio de la agregación a baja concentración de una mezcla acuosa de oleato y linoleato de sodio.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, p. 194
Congreso: Congreso Iberoamericano Química. 75 años de la Sociedad de Química. XXIV Congreso Peruano de Química
Lugar de celebración: Cuzco (Perú) *Fecha:* 2008 *Carácter:* Internacional
-
- 72.- *Autores:* M. B. Sierra, M. A. Morini, J. L. Rodríguez, R.M. Minardi, E.P. Schulz, M.A. Frechero, E. Junquera, E. Aicart y P. C. Schulz
Título: Monocapas en la interfase aire/solución de mezclas de bromuro de deciltrimetilamonio y de hexadeciltrimetilamonio. Una no idealidad causada por la diferencia de longitud de las cadenas hidrocarbonadas.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, CD. ISBN: 978-987-633-025-1
Congreso: XVI Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica
Lugar de celebración: Salta (Argentina) *Fecha:* 2009 *Carácter:* Internacional
-
- 73.- *Autores:* A. Rodriguez, E. Aicart y E. Junquera
Título: Electrochemical and spectroscopic aspects of the formation process of octadecyltrimethylammonium bromide/DNA Surfoplexes.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, Contribución 423, p. 133
Congreso: ICSCS2009, 13th Int. Association of Colloid & Interface Scientists Conference on Surface and Colloid Science
Lugar de celebración: Nueva York (EEUU) *Fecha:* 2009 *Carácter:* Internacional
-
- 74.- *Autores:* A. Martín-Molina, A. Rodriguez, O. Llorca, C. Rodríguez-Beas, E. Aicart y E. Junquera
Título: Compactation mechanism of DNA by cationic vesicles: An experimental and theoretical approach
Tipo de participación: Presentación Oral
Publicación: Libro de resúmenes, Contribución 1222, p. 364
Congreso: ICSCS2009, 13th Int. Association of Colloid & Interface Scientists Conference on Surface and Colloid Science
Lugar de celebración: Nueva York (EEUU) *Fecha:* 2009 *Carácter:* Internacional
-

- 75.- *Autores:* H. Vázquez-Villa, D. Alonso, J. A. González Vera, F. Martínez Esperón, A. Viso, R. Fernández de la Pradilla, E. Aicart, E. Junquera, S. Ortega-Gutiérrez, B. Benhamú, M. L. López-Rodríguez
Título: Synthesis of chemical probes for the study of serotonin 5-HT_{1A} and 5-HT₆ receptors
Tipo de participación: Presentación Oral
Congreso: Escuela de verano: “Desarrollo de nuevos fármacos”, Universidad de Castilla-La Mancha
Lugar de celebración: Toledo *Fecha:* 2009 *Carácter:* Internacional
-
- 76.- *Autores:* A. Rodríguez-Pulido, A. Martín-Molina, C. Martínez-Beas, O. Llorca, E. Aicart y E. Junquera
Título: Effect of the helper zwitterionic lipid on the compactation process of DNA by cationic lipids.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, comunicación P-028, p. 165
Congreso: III Reunión Ibérica de Coloides e Interfases y VIII Reunión Grupo de Coloides e Interfases de la Real Soc. Esp. Química.
Lugar de celebración: Granada (España) *Fecha:* 2009 *Carácter:* Internacional
-
- 77.- *Autores:* E. Aicart
Título: Nanocompactación coloidal del DNA.
Tipo de participación: Conferencia invitada
Congreso: International Workshop “Perspectivas en Ciencia de Biocoloides”
Lugar de celebración: Madrid (España) *Fecha:* 2010 *Carácter:* Internacional
-
- 78.- *Autores:* M. Muñoz-Úbeda, A. Rodríguez-Pulido, A. Nogales, O. Llorca, E. Aicart y E. Junquera
Título: Effect of the cationic lipid structure on the compaction process of DNA.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, comunicación P-306, p. 524
Congreso: International Soft Matter Conference 2010
Lugar de celebración: Granada (España) *Fecha:* 2010 *Carácter:* Internacional
-
- 79.- *Autores:* A. Rodríguez-Pulido, A. Casado, M. Muñoz-Úbeda, E. Junquera y E. Aicart
Título: Experimental and theoretical approach of the sodium decanoate-dodecanoate mixed system in aqueous solution.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, comunicación P-418, p. 651
Congreso: Internacional Soft Matter Conference 2010
Lugar de celebración: Granada (España) *Fecha:* 2010 *Carácter:* Internacional
-
- 80.- *Autores:* A. Rodríguez-Pulido, M. Muñoz-Úbeda, E. Junquera y E. Aicart
Título: Colloidal nanocompaction of DNA.
Tipo de participación: Conferencia Invitada
Publicación: Libro de resúmenes, comunicación Track 1-1, p. 040
Congreso: BIT’s 1st Annual World Conference of Nanomedicine 2010
Lugar de celebración: Beijing (China) *Fecha:* 2010 *Carácter:* Internacional
-

- 81.- *Autores:* A. B. Dávila-Ibáñez, E. Junquera, E. Aicart y V. Salgueiriño
Título: DNA functionalized magnetic nanoparticles.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes
Congreso: EUROMAT 2011. European Congress and Exhibition on Advanced and Materials and Processes
Lugar de celebración: Montpellier (Francia) *Fecha:* 2011 *Carácter:* Internacional
-
- 82.- *Autores:* M. Muñoz-Úbeda, A. L. Barrán-Berdón, M. B. Sierra, C. Aicart-Ramos, J. Biswas, S. K. Mishra, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart
Título: Biophysical and transfection studies of gemini/DOPE- pEGFP-C3 plasmid DNA lipoplexes.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, comunicación P6.14, pag. 181
Congreso: IV Iberian Meeting on Colloids and Interfases, y IX Reunión Grupo de Coloides e Interfases de la Real Soc. Esp. Química.
Lugar de celebración: Porto (Portugal) *Fecha:* 2011 *Carácter:* Internacional
-
- 83.- *Autores:* A. L. Barrán-Berdón, M. Muñoz-Úbeda, M. B. Sierra, C. Aicart-Ramos, L. Pérez, M. R. Infante, E. Aicart y E. Junquera
Título: Lysine derivated cationic lipid like genetic carriers: C₆(N^αLK)₂.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, comunicación P6.1, pag. 168
Congreso: IV Iberian Meeting on Colloids and Interfases, y IX Reunión Grupo de Coloides e Interfases de la Real Soc. Esp. Química.
Lugar de celebración: Porto (Portugal) *Fecha:* 2011 *Carácter:* Internacional
-
- 84.- *Autores:* M. Muñoz-Ubeda, A. L. Barrán, A. Rodríguez-Pulido, A. Martín-Molina, E. Junquera y E. Aicart
Título: Cationic lipids as nonviral compacting agents of DNA.
Tipo de participación: Conferencia
Publicación: Libro de resúmenes, comunicación ID 10977, pag. 88-Tech. Coll.
Congreso: 242nd American Chemical Society National Meeting & Exposition
Lugar de celebración: Denver (USA) *Fecha:* 2011 *Carácter:* Internacional
-
- 85.- *Autores:* A. L. Barrán-Berdón, M. Muñoz-Ubeda, M. B. Sierra, C. Aicart-Ramos, L. Pérez, M. R. Infante, E. Aicart y E. Junquera
Título: Physicochemical characterization of lipoplex formed by lisyne derivated cationic lipids with plasmidic DNA and linear DNA.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, p. 79
Congreso: VIII Simposio de Investigadores Jóvenes de la RSEQ
Lugar de celebración: Torremolinos (España) *Fecha:* 2011 *Carácter:* Nacional
-
- 86.- *Autores:* M. Muñoz-Úbeda, A. L. Barrán-Berdón, C. Aicart-Ramos, S. K. Misra, E. Junquera, S. Bhattacharya y E. Aicart
Título: Gemini/DOPE-plasmid DNA lipoplexes: A biophysical characterization.
Tipo de participación: Conferencia
Publicación: Libro de resúmenes, C-20, p. 44
Congreso: VIII Congreso de Investigadores Jóvenes de la RSEQ
Lugar de celebración: Torremolinos (España) *Fecha:* 2011 *Carácter:* Nacional
-

- 87.- *Autores:* M. Muñoz-Úbeda, A. L. Barrán-Berdón, S. K. Misra, S. Bhattacharya, E. Junquera y E. Aicart
Título: Compaction of pEGFP-C3 plasmid DNA by several gemini/DOPE mixed liposomes.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, P1.38
Congreso: Colloids and Nanomedicine
Lugar de celebración: Amsterdam (Holanda) *Fecha:* 2012 *Carácter:* Internacional
-
- 88.- *Autores:* S. K. Misra, M. Muñoz-Úbeda, S. Datta, E. Junquera, E. Aicart y S. Bhattacharya
Título: Investigation of high transfection efficiency and low cytotoxicity of small spacer cationic gemini surfactants based lipoplexes with plasmid DNA by small-angle X-ray scattering.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, SP38
Congreso: 12th International Conference on Surface X-ray and Neutron Scattering
Lugar de celebración: Kolkata (India) *Fecha:* 2012 *Carácter:* Internacional
-
- 89.- *Autores:* A. L. Barrán-Berdón, M. Muñoz-Úbeda, C. Aicart-Ramos, L. Pérez, A. Martín-Molina, P. Castro-Hartmann, E. Aicart y E. Junquera
Título: How chirality may affect to the self-aggregation pattern of lysine-based cationic gemini lipids and their interaction with plasmid DNA?. Ribbon-type and cluster-type lipoplexes.
Tipo de participación: Conferencia
Publicación: Libro de resúmenes, PSS21, p. 139
Congreso: 5th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, RIC15
Lugar de celebración: San Sebastián *Fecha:* 2013 *Carácter:* Internacional
-
- 89.- *Autores:* A. L. Barrán-Berdón, S.K. Misra, S. Bhattacharya, E. Junquera y E. Aicart
Título: Cationic Gemini lipids possessing oxyethylene spacers as plasmid vectors in gene therapy.
Tipo de participación: Póster
Publicación: Libro de resúmenes, P-33
Congreso: X Simposio de Investigadores Jóvenes
Lugar de celebración: Madrid *Fecha:* 2013 *Carácter:* Nacional
-

Tesis Doctorales Dirigidas

- 1.- *Título:* Termodinámica de mezclas binarias de hidrocarburos a partir de la compresibilidad isotérmica y de la expansibilidad isobárica.
Doctorando: ASUNCION DOMINGUEZ MATILLA
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 1989
Calificación: Sobresaliente *cum laude*
Directores: Emilio Aicart Sospedra y Gloria Tardajos Rodríguez

 - 2.- *Título:* Complejos de inclusión de ciclodextrinas en medios micelares.
Doctorando: ELENA JUNQUERA GONZALEZ
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 1992
Calificación: Sobresaliente *cum laude*
Directores: Gloria Tardajos Rodríguez y Emilio Aicart Sospedra

 - 3.- *Título:* Procesos de agregación en sistemas coloidales complejos. Micelas y vesículas mixtas.
Doctorando: PATRICIA DEL BURGO ESTEVEZ
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 2007
Calificación: Sobresaliente *cum laude*
Directores: Emilio Aicart Sospedra y Elena Junquera González

 - 4.- *Título:* Nanocompactación coloidal del ADN: Lipoplejos y surfoplejos
Doctorando: ALBERTO RODRÍGUEZ PULIDO
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 2009
Calificación: Sobresaliente *cum laude*
Directores: Elena Junquera González y Emilio Aicart Sospedra

 - 5.- *Título:* Nanocompactación coloidal del ADN
Doctorando: MÓNICA MUÑOZ ÚBEDA
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 2013
Calificación: Sobresaliente *cum laude*
Directores: Elena Junquera González y Emilio Aicart Sospedra

 - 6.- *Título:* Compactación de DNA con nuevos lípidos gemini derivados de lisina
Doctorando: ANA LILIA BARRÁN BERDÓN
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 2010 - en curso
Directores: Elena Junquera González y Emilio Aicart Sospedra
-

7.- *Título:* Nuevas estrategias de compactación y transfección de DNA/RNA en terapia génica
Doctorando: MARÍA MARTÍNEZ NEGRO
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 2013 - en curso
Directores: Elena Junquera González y Emilio Aicart Sospedra

Tesinas y Proyectos de Licenciatura Dirigidos

1.- *Título:* Compresibilidad isotérmica de tolueno + n-hexano y tolueno + n-octano.
Licenciado: JUAN GARBAJOSA SOPEÑA
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 1980

2.- *Título:* Compresibilidad isotérmica de metilciclohexano + tolueno y metilciclohexano + ciclohexano.
Licenciado: LUZ REY DEL CASTILLO
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 1983

3.- *Título:* Termodinámica de tolueno + n-decano y tolueno + n-dodecano.
Licenciado: ISABEL GAMBOA MUTUBERRIA
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 1984

4.- *Título:* Aplicaciones de la velocidad del sonido al estudio de mezclas líquidas: 1-clorobutano + n-alcanos.
Licenciado: ELENA JUNQUERA GONZALEZ
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 1988

5.- *Título:* Estudio del complejo de inclusión de β -ciclodextrina y bromuro de dodeciltrimetilamonio.
Licenciado: FRANCISCO JAVIER GONZALEZ BENITO
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 1992

6.- *Título:* Microencapsulación de los bromuros de dodeciltrimetilamonio y dodeciletildimetilamonio con β -ciclodextrina o con 2,6-di-O-metil- β -ciclodextrina.
Licenciado: LOURDES PEÑA DE LA IGLESIA
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 1993

7.- *Título:* Comportamiento del n-octil- β -glucopiranosido en disolución, en ausencia y presencia de electrolitos.

Licenciado: OSCAR PASTOR ROJO
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 1997

- 8.- *Título:* Determinación simultánea de constantes de asociación de complejos ciclodextrina: ácido/base conjugados. Estudio del sistema β -CD y derivados del ácido salicílico. Efecto de la temperatura y del disolvente.
Licenciado: DAVID RUIZ VICENTE
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 1998
-
- 9.- *Título:* Termodinámica del proceso de encapsulación molecular del ácido gentísico y del ácido gálico en disolución acuosa.
Licenciado: NOELIA MARTÍNEZ SANZ
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 1999
-
- 10.- *Título:* Vectorización de un anestésico local, el clorhidrato de procaina, en disolución acuosa.
Licenciado: M^a DEL CAMINO MERINO BENITO
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 1999
-
- 11.- *Título:* Vectorización de fármacos con ciclodextrinas.
Licenciado: JUAN CARLOS ROMERO RUIZ
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 2000
-
- 12.- *Título:* Caracterización de sistemas fármaco / tensioactivo en disolución.
Licenciado: ALBERTO RODRIGUEZ PULIDO
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 2003
-
- 13.- *Título:* Solubilización de fármacos en agregados supramoleculares.
Licenciado: JESSICA CANO RUBIO
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 2006
-
- 14.- *Título:* Vectorización coloidal de sustratos de interés biológico.
Licenciado: ELENA LORENTE GALÁN
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 2006
-
- 15.- *Título:* Genosomas: vectorización de la molécula de ADN con liposomas catiónicos.
Licenciado: IRENE NAVARRO SERRANO
Universidad: Complutense de Madrid

Diplomas de Estudios Avanzados (DEA) Dirigidos

- 1.- *Título:* Agregados supramoleculares mixtos en disolución acuosa. Análisis experimental y teórico.
Doctorando: PATRICIA DEL BURGO ESTÉVEZ
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 2004

 - 2.- *Título:* Compactación de ADN con liposomas catiónicos.
Doctorando: ALBERTO RODRIGUEZ PULIDO
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 2007

 - 3.- *Título:* Nanocompactación coloidal del DNA con el liposoma catiónico mixto DOEPC/DOPE.
Doctorando: MÓNICA MUÑOZ ÚBEDA
Universidad: Complutense de Madrid
Facultad / Escuela: Ciencias Químicas
Año: 2010
-

Estancias de Investigación Dirigidas

1.- Prof. Dr. M. Costas, UNAM (México)	2 meses	<i>Fecha:</i> 1988
2.- Prof. T. Fergoug, Univ. Mascara (Argelia)	1 mes	<i>Fecha:</i> 2003
3.- Prof. M.B. Sierra, Univ. Bahía Blanca (Argentina)	2 meses	<i>Fecha:</i> 2006
4.- Prof. J.L. Rodríguez, Univ. Bahía Blanca (Argentina)	1 mes	<i>Fecha:</i> 2006
5.- Prof. P.C. Schulz, Univ. Bahía Blanca (Argentina)	1 mes	<i>Fecha:</i> 2006
6.- Prof. P.V. Messina, Univ. Bahía Blanca (Argentina)	1 mes	<i>Fecha:</i> 2006
7.- Prof. J. Biswas, Indian Inst. Sci., Bangalore (India)	2 meses	<i>Fecha:</i> 2010
8.- Dr. D. Alonso, Inv. Posdoctoral Contratada (España)	1 año	<i>Fecha:</i> 2010
9.- Prof. A.B. Dávila, Univ. Santiago, (España)	2 semanas	<i>Fecha:</i> 2011
10.- Prof. M.B. Sierra, Univ. Bahía Blanca (Argentina)	3 meses	<i>Fecha:</i> 2011
11.- Prof. S. Bhattacharya, Indian Inst. Sci., Bangalore (India)	3 semanas	<i>Fecha:</i> 2011
12.- Prof. S. K. Misra, Indian Inst. Sci., Bangalore (India)	6 semanas	<i>Fecha:</i> 2011
13.- Prof. S. Bhattacharya, Indian Inst. Sci., Bangalore (India)	3 semanas	<i>Fecha:</i> 2012
14.- Prof. K. Kumar, Indian Inst. Sci., Bangalore (India)	4 semanas	<i>Fecha:</i> 2013

Participación en Comités y Representaciones Nacionales / Internacionales

1.- *Título del Comité:* Internacional Advisory Board

Entidad de la que depende: Jordan Journal of Chemistry

Tema: Internacional Peer-Reviewed Research Journal

Fecha: 2006- continúa

2.- *Título del Comité:* Internacional Advisory Board

Entidad de la que depende: The Open Colloid Science Journal

Tema: Internacional Peer-Reviewed Research Journal

Fecha: 2008- continúa

3.- *Título del Comité:* Comité de Ciencias Experimentales

Entidad de la que depende: Agencia Nacional para la Evaluación de la Calidad (ANECA)

Tema: Evaluación de la calidad de los Programas de Doctorado

Fecha: 2006- continúa

4.- *Título del Comité:* Comité de Ciencias Experimentales

Entidad de la que depende: Agencia de Calidad, Acreditación y Prospectiva de las Universidades de Madrid (ACAP)

Tema: Evaluación del Profesorado universitario para su contratación por las Universidades de Madrid

Fecha: 2008- continúa

Grandes Equipos que utiliza o ha utilizado

CLAVE: R = responsable, UA = usuario asiduo, UO = usuario ocasional.

<i>Equipo:</i> Compresibilidad Isotérmica	<i>Fecha:</i> 1975-1995	<i>Clave:</i> UA
<i>Equipo:</i> Expansibilidad Isobárica	<i>Fecha:</i> 1975-Cont.	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> Velocidad del Sonido en Líquidos	<i>Fecha:</i> 1982-Cont.	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> Compresibilidad Adiabática	<i>Fecha:</i> 1982-Cont.	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> Capacidad Calorífica	<i>Fecha:</i> 1987	<i>Clave:</i> UO
<i>Equipo:</i> Densidad y Volumen Aparente	<i>Fecha:</i> 1987-Cont.	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> Técnicas Ultrasónicas de Relajación	<i>Fecha:</i> 1989-cont	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> Conductividad	<i>Fecha:</i> 1989-Cont.	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> Potenciometría con electrodos selectivos (ISE)	<i>Fecha:</i> 1992-Cont.	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> Espectroscopia de Fluorescencia	<i>Fecha:</i> 1994-Cont.	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> Espectroscopia de UV-vis-NIR	<i>Fecha:</i> 1996-Cont.	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> Potencial Zeta por Láser-Doppler-Electroforesis	<i>Fecha:</i> 2002-Cont.	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> Turbidimetría	<i>Fecha:</i> 2006-Cont.	<i>Clave:</i> R
<i>Equipo:</i> SAXS	<i>Fecha:</i> 2008-Cont.	<i>Clave:</i> UA

Cursos / Conferencias impartidas en Centros Docentes y/o de Investigación

- 1.- Profesor del X Curso de Verano, Univ. Alcalá Henares (Madrid) *Fecha:* 1993
- 2.- Impartición de 2 Conferencias en la UNAM, México DF (México) *Fecha:* 1987
- 3.- Impartición de 1 Conferencia en la Univ. de Saskatoon (Canadá) *Fecha:* 1989
- 4.- Impartición de 3 Conferencias en la Univ. de Bahía Blanca (Argentina) *Fecha:* 2003-2006
- 5.- Impartición de 2 Conferencias en la Univ. California, Santa Barbara (USA) *Fecha:* 2008
- 6.- Impartición de 1 Conferencia en el IISc, Bangalore (India) *Fecha:* 2010
- 7.- Impartición de 1 Conferencia en el Indian Center Leather Res. Inst., Chennai (India) *Fecha:* 2011
- 8.- Impartición de 1 Conferencia en el IISc, Bangalore (India) *Fecha:* 2011
- 9.- Impartición de 1 Conferencia en la universidad de Cádiz (España) *Fecha:* 2012
- 10.- Impartición de 1 Conferencia en la Universidad de Alcalá de Henares (España) *Fecha:* 2012

**Otros Méritos o aclaraciones que se desee hacer constar
(utilice únicamente el espacio equivalente a una página).**

-
- | | |
|--|--------------------------|
| 1.- Premio Nacional Fin de Carrera "Mejores Becarios" (MEC) | <i>Fecha:</i> 1975 |
| 2.- Beca FPI para realizar la Tesis Doctoral (MEC) | <i>Fecha:</i> 1977-80 |
| 3.- Beca Cooperación con Iberoamérica (MEC), (estancia en Méxic, DF) | <i>Fecha:</i> 1987 |
| 4.- Beca Profs. en el Extranjero (MEC), (estancia en Saskatoon, Canada) | <i>Fecha:</i> 1989 |
| 5.- Beca Profs. en el Extranjero (MEC), (estancia en Santa Barbara, CA, USA) | <i>Fecha:</i> 2008 |
| 6.- Secretario del Departamento de Química Física I, (F. Químicas, UCM) | <i>Fecha:</i> 1983-87 |
| 7.- Censor de las siguientes Revistas Internacionales: | |
| - Journal of Chemical Thermodynamics | <i>Fecha:</i> 1988-92 |
| - Journal of Chemical Engineering Data | <i>Fecha:</i> 1982-2004 |
| - Journal of Solution Chemistry | <i>Fecha:</i> 1986-2003 |
| - Journal of Molecular Liquids | <i>Fecha:</i> 1996-2003 |
| - Journal Organic Chemistry | <i>Fecha:</i> 1997-2002 |
| - European Journal of Pharmaceutical Sciences | <i>Fecha:</i> 1999-2003 |
| - Journal Inclusion Phenomena and Molecular Recognition in Chemistry | <i>Fecha:</i> 1996-cont. |
| - Journal of Colloid Interface Science | <i>Fecha:</i> 1996-cont. |
| - Journal of Physical Chemistry | <i>Fecha:</i> 1997-cont. |
| - Langmuir | <i>Fecha:</i> 1996-cont. |
| - Supramolecular Chemistry | <i>Fecha:</i> 1999-cont. |
| - Colloid and Surfaces A. Physicochemical and Engineering Aspects | <i>Fecha:</i> 2003-cont. |
| - Journal of Pharmaceutical Sciences | <i>Fecha:</i> 2002-cont. |
| - Chemical Physics | <i>Fecha:</i> 2005-cont. |
| - Biomacromolecules | <i>Fecha:</i> 2005-cont. |
| 8.- Evaluador de: | |
| - Agencias Nacionales de Evaluación (ANEP), (ANECA) y (ACAP) | <i>Fecha:</i> 1999-cont. |
| - Dirección Xeral Investigación (Xunta de Galicia) | <i>Fecha:</i> 2005-con. |
| - Agencia para la Calidad del Sistema Universitario de Castilla y León | <i>Fecha:</i> 2008-con. |
| - Agencia Andaluza de Evaluación (GESVAL-AGAE) | <i>Fecha:</i> 2010-con. |
| - Austrian Science Fund (FWF) | <i>Fecha:</i> 1999-cont. |
| - Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica (ARGENTINA) | <i>Fecha:</i> 2004-cont. |
| 9.- Colaboración Investigadora con: | |
| - Prof. G.C. Benson (Ottawa, Canada) | <i>Fecha:</i> 1982-84 |
| - Prof. D. Patterson (Montreal, Canada) | <i>Fecha:</i> 1984-96 |
| - Prof. M. Costas (México, D.F.) | <i>Fecha:</i> 1984-94 |
| - Prof. R.E. Verrall (Saskatoon, Canada) | <i>Fecha:</i> 1989-97 |
| - Prof. T.M. Letcher (Natal, Sudáfrica) | <i>Fecha:</i> 1990-95 |
| - Dr. J. Jiménez-Barbero (CSIC, Madrid) | <i>Fecha:</i> 1997-2001 |
| - Prof. F. Mendicuti (Univ. Alcalá) | <i>Fecha:</i> 1998-99 |
| - Profs. S. López y M. Ruiz (Univ. Polit. Madrid) | <i>Fecha:</i> 2001-05 |
| - Prof. P.C. Schulz (Bahía Blanca, Argentina) | <i>Fecha:</i> 2003-2010 |
| - Dr. O. Llorca (CIB-CSIC, Madrid) | <i>Fecha:</i> 2004-11 |
| - Dr. C. Safinya (Santa Barbara, USA) | <i>Fecha:</i> 2008-09 |
| - Dr. A. Martín-Molina (Univ. Granada) | <i>Fecha:</i> 2008-cont. |
| - Dra. A. Nogales (CSIC, Madrid) | <i>Fecha:</i> 2009-11 |
| - Prof. S. Bhattacharya (IISC, Bangalore, India) | <i>Fecha:</i> 2009-cont. |
| - Dras. L. Pérez y R.M. Infante (IQAC-CSIC, Barcelona) | <i>Fecha:</i> 2010-cont. |
| - Prof. L. García Río (Univ. Santiago) | <i>Fecha:</i> 2013-cont. |
| 10.- Coordinador Programa Doctorado "Química Física Aplicada", UCM-UAM | <i>Fecha:</i> 2003-11 |
| 11.- Director del Departamento de Química Física I, Químicas, UCM, Madrid | <i>Fecha:</i> 2002-06 |
| 12.- Concesión de 6 Quinquenios de Docencia | <i>Fecha:</i> 1976-05 |
| 13.- Concesión de 6 Sexenios de Investigación (MEC) | <i>Fecha:</i> 1976-2011 |
| Periodos: (1976-81)-(1982-87)-(1988-93)-(1994-99)-(2000-05)-(2006-11) | |



Ministerio de Economía y Competitividad.
Secretaría de Estado de Investigación,
Desarrollo e Innovación

Curriculum vitae

Nombre: **Francisco Javier Aoiz Moleres**

Fecha: **5 MARZO 2014**

ATENCIÓN: Deben firmarse al margen todas las hojas del curriculum

Apellidos: AOIZ MOLERES

Nombre: FRANCISCO JAVIER

DNI:

Fecha de nacimiento :

Sexo: V

Situación profesional actual

Organismo: UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

Facultad, Escuela o Instituto: CIENCIAS QUIMICAS

Depto./Secc./Unidad estr.: QUIMICA FISICA I

Dirección postal: Ciudad Universitaria s/n, 28040 Madrid

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 913944126

Fax: 913944135

Correo electrónico: aoiz@quim.ucm.es

Especialización (Códigos UNESCO): 2206,2210,220605,220607-1

Categoría profesional: Catedrático de Universidad

Fecha de inicio: 5 de junio de 2000

Situación administrativa

Plantilla

Contratado

Interino

Becario

Otras situaciones especificar:

Dedicación

A tiempo completo

A tiempo parcial

Líneas de investigación

Breve descripción, por medio de palabras claves, de la especialización y líneas de investigación actuales.

Dinámica molecular de las reacciones químicas. Espectroscopía láser. Haces moleculares. Método de trayectorias cuasiclásicas. Métodos mecanocuánticos de dispersión reactiva.

Formación Académica

Titulación Superior	Centro	Fecha
Ciencias Químicas	Universidad Complutense de Madrid	Junio 1976
Reválida de Grado con Tesina de Licenciatura	Universidad Complutense de Madrid	Enero 1977

Doctorado	Centro	Fecha
Ciencias Químicas	Universidad Complutense de Madrid	Marzo 1981

Actividades anteriores de carácter científico profesional

Puesto	Institución	Fechas
Profesor Ayudante contratado	Universidad Complutense de Madrid	1976-1980
Associated Researcher y Becario Fulbright/MEC	Columbia University	1981-1982
Profesor Encargado de curso	Universidad Complutense de Madrid	1983
Profesor Ayudante	Universidad Complutense de Madrid	1983-1984
Profesor Titular de Universidad	Universidad Complutense de Madrid	1984-2000
Profesor visitante	Universidad de Oxford	2005-2006

Idiomas (R = regular, B = bien, C = correctamente)

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Inglés	C	C	C
Francés	R	C	B

Participación en Proyectos de I+D financiados en Convocatorias públicas.

(nacionales y/o internacionales)

Título del proyecto: Estudio experimental de colisiones atómico moleculares. PB78/2771

Entidad financiadora: C.A.I.C.Y.T.

Entidades participantes: UCM

Duración, desde: 1979 hasta: 1982 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Angel González Ureña

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Reaction dynamics with lasers and molecular beams. CHE-81-16386 y CHE-77-11384

Entidad financiadora: National Science Foundation. EE.UU

Entidades participantes: Columbia University

Duración, desde: 1980 hasta: 1983 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Prof. R. B. Bernstein

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Reacciones químicas con especies excitadas. Fluorescencia inducida por láser. PB81/963.

Entidad financiadora: C.A.I.C.Y.T.

Entidades participantes: UCM

Duración, desde: 1983 hasta: 1986 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Angel González Ureña

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Subvención a grupos investigadores de reciente creación.

Entidad financiadora: C.A.I.C.Y.T.

Entidades participantes: UCM

Duración, desde: Enero 1987 hasta: Junio 1988 Cuantía de la subvención: 1.5 Mptas

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes: 1

Título del proyecto: Experimentos con haces moleculares. Estudio de reacciones químicas por ionización superficial, quimiluminiscencia y fluorescencia inducida por láser. PB85/007

Entidad financiadora: C.A.I.C.Y.T.

Entidades participantes: UCM

Duración, desde: 1987 hasta: 1988 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Angel González Ureña

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Espectroscopía Láser-Raman coherente e IR por diferencia de frecuencias ópticas: Estudio de moléculas y complejos débilmente ligados en haces moleculares. PB87/0263

Entidad financiadora: C.I.C.Y.T.

Entidades participantes: CSIC, Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: Junio 1988 hasta: Junio 1990 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Dionisio Bermejo Plaza

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Espectroscopía de ionización multifotónica con espectrómetro de masas de tiempo de vuelo. OP89/0150

Entidad financiadora: C.I.C.Y.T.

Entidades participantes: UCM

Duración, desde: Abril 1990 hasta: Cuantía de la subvención: 35 Mptas

Investigador responsable: José Campos Gutierrez

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Estudio de moléculas estables e iones moleculares mediante espectroscopía láser de alta resolución y técnicas de haces moleculares. PB89/0041

Entidad financiadora: C.I.C.Y.T.

Entidades participantes: CSIC, Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: Junio 1990 hasta: Junio 1992 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Dionisio Bermejo Plaza

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Fenómenos de interacción plasma-pared en dispositivos de fusión termonuclear. Medida de parámetros del borde del plasma por haces atómicos y de fenómenos de sputtering, por espectrometría de masas. PB90/0622-C03-01

Entidad financiadora: D.G.I.C.Y.T.

Entidades participantes: UCM, CSIC, UPM
Duración, desde: Octubre 1991 hasta: Octubre 1992 Cuantía de la subvención: 3 Mptas
Investigador responsable: Francisco Javier Aoz Molerés
Número de investigadores participantes: 1

Título del proyecto: Estudios experimentales y cálculos teóricos sobre la dinámica de la reacción $D+H_2 \rightarrow HD+H$. Programa de Intercambio Hispano-Alemán Acciones Integradas. HA-063
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Entidades participantes: CSIC, UCM, Universidad de Göttingen
Duración, desde: 1/1/1991 hasta: 31/12/1991 Cuantía de la subvención: 0.4 Mptas
Investigador responsable: Victor J. Herrero Ruíz de Loizaga
Investigador responsable alemán: J. P. Toennies
Número de investigadores participantes: 5

Título del proyecto: Estereodinámica de reacciones bimoleculares. Programa de Intercambio Hispano-Británico Acciones Integradas. 245A
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Entidades participantes: UCM, Universidad de Nottingham
Duración, desde: Abril 1992 hasta: Marzo 1993 Cuantía de la subvención: 0.504 Mptas
Investigador responsable: Francisco Javier Aoz Molerés
Investigador responsable británico: John P. Simons
Número de investigadores participantes: 5

Título del proyecto: Estudio experimental por medio de haces moleculares y láseres y teóricos mediante simulación con trayectorias cuasiclásicas de la reacción $H+H_2$ y sus variantes isotópicas. Programa de Intercambio Hispano-Alemán Acciones Integradas. HA-074
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Entidades participantes: UCM, Universidad de Bielefeld
Duración, desde: 1/1/1993 hasta: 31/12/1993 Cuantía de la subvención: 0.336 Mptas
Investigador responsable: Francisco Javier Aoz Molerés
Investigador responsable alemán: Karl H. Welge
Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: Espectroscopia de Ionización Multifotónica Resonante (REMPI) de Radicales. Cálculos de Dinámica de Reacciones Elementales. PB92/0219-C03-01
Entidad financiadora: D.G.I.C.Y.T.
Entidades participantes: Universidad Complutense, CSIC, UPM
Duración, desde: 1993 hasta: 1996 Cuantía de la subvención: UCM:13.110 Mptas
Investigador responsable: Francisco Javier Aoz Molerés
Número de investigadores participantes: UCM: 1

Título del proyecto: Estudio experimental por medio de haces moleculares y láseres y teóricos mediante simulación con trayectorias cuasiclásicas de la reacción $H+H_2$ y sus variantes isotópicas. Programa de Intercambio Hispano-Alemán Acciones Integradas. HA93-113
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Entidades participantes: Universidad Complutense, Universidad de Bielefeld
Duración, desde: 1/1/1994 hasta: 31/12/1994 Cuantía de la subvención: 0.392 Mptas
Investigador responsable: Francisco Javier Aoz Molerés
Investigador responsable alemán: Karl H. Welge
Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: Estudio experimental con láseres y haces moleculares y cálculos teóricos de trayectorias cuasiclásicas y mecanocuánticas. Secciones diferenciales reactivas resueltas en estados finales para las reacciones $H+D_2 \rightarrow HD+D$ y $D+H_2 \rightarrow HD+H$. Programa de Intercambio Hispano-Alemán Acciones Integradas. HA94-135.
Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, CSIC, Universidad de Bielefeld
Duración, desde: 1/1/1995 hasta: 31/12/1995 Cuantía de la subvención: 0.420 Mptas
Investigador responsable: Francisco Javier Aoz Molerés
Investigador responsable alemán: Karl H. Welge
Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: Dinámica tridimensional de reacciones bimoleculares: Experimentos y simulación teórica. Programa de Intercambio Hispano-Británico Acciones Integradas HB95-190B.

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, CSIC, Universidad de Oxford
Duración, desde: 1/4/1995 hasta: 31/3/1996 Cuantía de la subvención:
Investigador responsable: Victor José Herrero Ruíz de Loizaga
Investigador responsable británico: M. Brouard
Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: "Exploring ab initio potential energy surfaces for elementary bimolecular reactions. Classical and quantum mechanical dynamical calculations and direct comparison with the experiments." Programa de Intercambio Hispano-Alemán Acciones Integradas HA95-135 y HA96-135B.

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, CSIC, Universidad de Stuttgart
Duración, desde: 1/1/1996 hasta: 31/12/1997 Cuantía de la subvención: 0.760 Mptas
Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés
Investigador responsable alemán: H.-J. Werner
Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: Espectroscopía de Ionización Multifotónica Resonante (REMPI) de Radicales y Moléculas. Aplicación al estudio de reacciones elementales: Experimentos y cálculos teóricos. PB95/0918-C03

Entidad financiadora: D.G.I.C.Y.T.
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, CSIC, Universidad Politécnica de Madrid
Duración, desde: 1997 hasta: 1999 Cuantía de la subvención: 31.620 Mptas (UCM: 16.840 Mptas)
Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés
Número de investigadores participantes: UCM: 5

Título del proyecto: Cromatografía de gases y ablación láser con espectrometría de masas por tiempo de vuelo e ionización láser multifotónica (GC-LA/TOFMS-REMPI). Proyecto de Infraestructura científico-técnica IN97-0380. Programa Nacional de I+D en medio ambiente.

Entidad financiadora: D.G.I.C.Y.T.-Comunidad de Madrid-Universidad Complutense de Madrid
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid
Duración, desde: 1998 hasta: Cuantía de la subvención: 32 Mptas
Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés
Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Estudio de procesos de fotodisociación, reacciones elementales y transferencia de energía en fase gaseosa: experimentos con ionización multifotónica y cálculos teóricos PB98-0762-C03.

Entidad financiadora: D.G.I.C.Y.T.
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, (Coordinado CSIC, UPM)
Duración, desde: 2000 hasta: 2002 Cuantía de la subvención: 18 Mptas (UCM: 11Mptas)
Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés
Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Desarrollo de métodos analíticos por HPLC-DAD, GC-MS, GC-REMPI/TOFSMS para la determinación de hormonas sintéticas (trembolona, dietilestilbestrol, zeranol y similares) en piensos y agua destinada al consumo animal. O7G/0044/2000

Entidad financiadora: Consejería de Educación, Comunidad Autónoma de Madrid
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid
Duración, desde: 2001 hasta: 2002 Cuantía de la subvención: 3,564 Mptas.
Investigador responsable: Roberto Izquierdo Hornillos
Número de investigadores participantes: 10

Título del proyecto: Dinámica de reacciones químicas elementales. Estudios con haces moleculares y cálculos mecanocuánticos y de trayectorias cuasiclásicas para reacciones elementales de tres y cuatro átomos. Programa de Intercambio Hispano-Italiano Acciones Integradas HI1999-0081

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y cultura
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Perugia
Duración, desde: 2000 hasta: Diciembre 2001 Cuantía de la subvención: 1,320 Mptas

Investigador responsable: F. Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: Dinámica y cinética de reacciones químicas elementales de 3 y 4 átomos. Estudios experimentales y cálculos teóricos. Programa de Intercambio Hispno-Alemán Acciones Integradas HA1999-0050

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y cultura

Entidades participantes: CSIC, Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Heidelberg

Duración, desde: 2000 hasta: Diciembre 2001 Cuantía de la subvención: 1,320 Mptas.

Investigador responsable: Victor Herrero Ruíz de Loizaga

Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: REACTION DYNAMICS: Experimental and Theoretical Studies on the Dynamics of Reactions of Atoms and Radicals of Fundamental and Practical Importance. Research Training Network of the EC. Project HPRN-CT-1999-00007.

Entidad financiadora: UE

Entidades participantes: UCM, U. Perugia, U. Oxford, U. Bielefeld, U. Nijmegen, U. Stuttgart, U. Freiburg

Duración, desde: 2000 hasta: 2004 Cuantía de la subvención: 1.499.000 € (UCM: 150.000 €)

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Estudio experimental y teórico de la dinámica de fotodisociación y reacciones fotoiniciadas con detección de moléculas y radicales por espectroscopía láser multifotónica. BQU2002-04627-C02-02.

Entidad financiadora: Mrio de Ciencia y Tecnología

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, (Coordinado UPM)

Duración, desde: 2003 hasta: 2005 Cuantía de la subvención: 150.000, €

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes: 9

Título del proyecto: Ayudas para la movilidad del profesorado en programas de doctorado para Universidades públicas para el curso 2002-2003. Curso Interuniversitario de Doctorado de Química Teórica y Computacional.

.Entidad financiadora: Mrio de Educación, Cultura y Deportes

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2002 hasta: 2003 Cuantía de la subvención: 16.240, EUR

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes: 9

Título del proyecto: Organización de XVIII European Conference on Molecular Energy Transfer. Acción especial (COMET) BQU2002-10494-E.

Entidad financiadora: Mrio de Ciencia y Tecnología

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid.

Duración, desde: 2003 hasta: 2003 Cuantía de la subvención: 10.000, €

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: Sistema Láser de Femtosegundo. UNCM00-33-009

.Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid- Unión Europea

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2002 hasta: 2003 Cuantía de la subvención: 600.000, EUR

Investigadores responsables: Francisco Javier Aoiz Molerés y Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: Equipamiento para el Centro de Determinación Molecular. UNCM01-35-002

.Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid- Unión Europea

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2002 hasta: 2003 Cuantía de la subvención: 227.772,10 EUR

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerés

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Organización de Reuniones Científicas y Congresos de la UCM-2002 para la organización del evento: "XVIII European Conference on Molecular Energy Transfer"

.Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2003 hasta: 2003 Cuantía de la subvención: 2.400,00 EUR

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerres

Número de investigadores participantes: 1

Título del proyecto: Proyecto de acondicionamiento y reubicación del Centro de determinación Estructural Molecular UNCMA-C002

.Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid- Unión Europea

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 2003 hasta: 2004 Cuantía de la subvención: 2.123.857, EUR

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerres

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto: Estudio de la Dinámica molecular de procesos químicos mediante técnicas láser de nanosegundo y femtosegundo y métodos teóricos. CTQ2005-08493-C01-01/BQU.

Entidad financiadora: Mrio de Educación y Ciencia. Plan Nacional de I+D+I

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, (Coordinado UPM)

Duración, desde: 2006 hasta: 2008 Cuantía de la subvención: 160.000, €

Investigador responsable: Luis Bañares Morcillo

Número de investigadores participantes: 11

Título del proyecto: Red Temática Quimiláser

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia CTQ2004-22423-E

Entidades participantes: Universidad de Valladolid, Universidad Complutense de Madrid, etc.

Duración, desde: 2006 hasta: 2006 Cuantía de la subvención: 13.000 euros

Investigador principal: José Luis Alonso Hernández

Número de investigadores participantes:>10

Título del proyecto: Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación Universidad Complutense-Comunidad de Madrid IV PRICIT: Grupo de Dinámica molecular de las reacciones químicas y femtoquímica.

Entidad financiadora: Comunidad de Madrid-U.C.M. Grupo: 910729

Entidades participantes: Universidad de Complutense de Madrid

Duración, desde: 30/12/2005 hasta: 29/12/2006 Cuantía de la subvención: 15.210, euros

Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerres

Número de investigadores participantes: 11

Título del proyecto: Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación Universidad Complutense-Comunidad de Madrid: Grupo Dinámica molecular de las reacciones químicas y femtoquímica.

Entidad financiadora: Comunidad de Madrid-U.C.M. Grupo: 910729

Entidades participantes: Universidad de Complutense de Madrid

Duración, desde: 1/1/2007 hasta: 31/12/2007 Cuantía de la subvención: 14.000, euros

Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerres

Número de investigadores participantes: 10

Título del proyecto: Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación Universidad Complutense-Comunidad de Madrid: Grupo Dinámica molecular de las reacciones químicas y femtoquímica.

Entidad financiadora: Comunidad de Madrid-U.C.M. Grupo: 910729

Entidades participantes: Universidad de Complutense de Madrid

Duración, desde: 1/1/2008 hasta: 31/12/2008 Cuantía de la subvención: 9.3000, euros

Investigador principal: Francisco Javier Aoiz Molerres

Número de investigadores participantes: 10

Título del proyecto: "Dinámica de procesos químicos: Experimentos fotoiniciados con láseres de nanosegundo y femtosegundo y métodos teóricos".

Proyecto: **CTQ2008-02578/BQU** (Tipo C, 5 años).

Entidad financiadora: Mrio de Educación y Ciencia. Plan Nacional de I+D+I

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Salamanca, Universidad del País Vasco.

Duración, desde: 1/1/2009 hasta: 31/12/2013 Cuantía de la subvención: 453.000, €

Investigador responsable: Francisco Javier Aoiz Molerres

Número de investigadores participantes: 18

Título del proyecto: "Molecular Astrophysics: The Herschel and Alma era". CDS2009-00038

Proyecto **Consolider-Ingenio 2010**. Ministerio de Ciencia e Innovación.

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Participantes: CSIC-CAB, Universidad Complutense de Madrid, Universidad de Valladolid, Universidad de Castilla la Mancha, CSIC, Instituto Geográfico Nacional, Universidad Pablo Olavide, Universidad de Murcia, Instituto de Astrofísica de Canarias.

Coordinador del Proyecto: José Cernicharo Quintanilla (CSIC-CAB)

Coordinador UCM: Francisco Javier Aoiz Molerés

Dates: 2010-2014 Soporte financiero total: 4.000.000 euros.

Número de investigadores UCM 11

Título del proyecto: "Dinámica de procesos moleculares mediante experimentos con láser y métodos teóricos."

Proyecto **CTQ2012-37404-C02-01**.

Entidad financiadora: Ministerio de Economía y Competitividad.

Participantes: Universidad Complutense de Madrid. Coordinado con la Universidad de Salamanca. ,

IP UCM y Coordinador de los subproyectos: F. Javier Aoiz Molerés

Dates: 2013-2015 Soporte financiero total: 217.000 euros.

Número de investigadores UCM 15

Publicaciones o Documentos Científico-Técnicos

(CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = "review", E = editor,
S = Documento Científico-Técnico restringido.)

1.

Autores (p.o. de firma): A. González Ureña, F. J. Aoiz

Título: Simple Cross-section model for elementary reactions

Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro

Clave: A Volumen: **51** Páginas, inicial: 281 final: 286 Fecha: 1977

2.

Autores (p.o. de firma): A. González Ureña, V.J. Herrero, F. J. Aoiz

Título: Dynamical model for the 'translational excitation features' in the atom Diatom reaction cross section

Ref. revista: Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **44** Páginas, inicial: 81 final: 91 Fecha: 1979

3.

Autores (p.o. de firma): A. González Ureña, V.J. Herrero, F. J. Aoiz

Título: A general discussion on kinetics of state selected species

Ref. revista: Faraday Discussions Chem. Soc. Libro

Clave: A Volumen: **67** Páginas, inicial: 138 final: 140 Fecha: 1979

4.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V.J. Herrero, A. González Ureña

Título: Observed translational energy dependence of the $K+C_2H_5I \rightarrow KI+C_2H_5$ reaction cross section from 0.17 to 0.55 eV (c.m.)

Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro

Clave: A Volumen: **74** Páginas, inicial: 398 final: 399 Fecha: 1980

5.

Autores (p.o. de firma): A. González Ureña, F. J. Aoiz, V.J. Herrero

Título: Estudio de reacciones químicas por haces moleculares

Ref. revista: Revista de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales Libro

Clave: A Volumen: **74** Páginas, inicial: 339 final: 341 Fecha: 1980

6.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V.J. Herrero, A. González Ureña

Título: Molecular beam study of the $K+C_2H_5I \rightarrow KI+C_2H_5$ reaction cross section from 0.17 eV to 0.55 eV (c.m.)

Ref. revista: Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **59** Páginas, inicial: 61 final: 73 Fecha: 1981

7.

Autores (p.o. de firma): V. J. Herrero, F. L. Tabares, V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, A. González Ureña

Título: Differential reaction cross section of the $C_2H_5X(X=Br,I)+KI \rightarrow KX+C_2H_5$ systems

Ref. revista: Mol. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **44** Páginas, inicial: 1239 final: 1256 Fecha: 1981

8.

Autores (p.o. de firma): M. M. Oprysko, F. J. Aoiz, M. A. McMahan, R. B. Bernstein

Título: The reaction $Hg+I_2 \rightarrow HgI+I$ revisited

Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **78** Páginas, inicial: 3816 final: 3831 Fecha: 1983

9.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. M. Oprysko, R. B. Bernstein

Título: Argon ion laser excitation of supersonic seeded molecular beams of I_2

Ref. revista: Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **79** Páginas, inicial: 321 final: 339 Fecha: 1983

10.

Autores (p.o. de firma): M. M. Oprysko, F. J. Aoiz, R. B. Bernstein, M. A. McMahan

Título: Search for the laser-induced crossed beam reaction of excited $I_2(B^3\Pi_0)$ with Hg

Ref. revista: Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **79** Páginas, inicial: 341 final: 350 Fecha: 1983

11.

Autores (p.o. de firma): V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, V. J. Herrero, E. Verdasco, A. González Ureña

Título: Molecular beam study of the radical group effect in the $K+RI \rightarrow KI+R(R=CH_3, C_2H_5, nC_3H_7)$ reactive collisions

Ref. revista: Mol. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **59** Páginas, inicial: 707 final: 720 Fecha: 1986

12.

Autores (p.o. de firma): F.J. Aoiz, L. Bañares, F.L. Tabarés, A. González Ureña

Título: Reactor de flujo rápido de gases con descarga de microondas y detección por fluorescencia inducida por láser.

Aplicación a reacciones tipo NH_2+ molécula orgánica

Ref. revista: Studia Chemica Libro

Clave: A Volumen: **11** Páginas, inicial: 227 final: 235 Fecha: 1986

13.

Autores (p.o. de firma): E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, A. González Ureña

Título: Influence of the radical group upon total reaction cross sections: molecular beam study of the $K+RI \rightarrow KI+R(R=CH_3, C_2H_5, C_3H_7)$ reactions

Ref. revista: Mol. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **62** Páginas, inicial: 1207 final: 1211 Fecha: 1987

14.

Autores (p.o. de firma): E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, A. González Ureña

Título: Chemiluminescence from the $Ca^*(^3P)+SF_6$ reaction: absolute cross section, photon yields and electronic branching

Ref. revista: J. Phys. Chem. Libro

Clave: A Volumen: **91** Páginas, inicial: 2073 final: 2075 Fecha: 1987

15.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz

Título: Lasers in molecular beam experiments

Ref. revista: Libro: Capítulo en Lasers and their Applications

Clave: **CL** Volumen: Páginas, inicial: 408 final: 434 Fecha: 1987

Editorial (si libro): A. Y. Spasov, Ed.; World Scientific Publishing Co. ISBN 9971-50-320-4

Lugar de publicación: Singapore

16.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos

Título: Effect of rotation on the reactivity of the $D+H_2(v=1) \rightarrow HD+H$ system at translational energies 0.25, 0.35 and 0.45 eV

Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro

Clave: A Volumen: **161** Páginas, inicial: 270 final: 276 Fecha: 1989

17.

Autores (p.o. de firma): V. J. Herrero, I. Tanarro, F. J. Aoiz, V. Sáez Rábanos

Título: Formación de agregados debilmente unidos en haces moleculares

Ref. revista: Revista de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales Libro

Clave: A Volumen: **84** Páginas, inicial: 381 final: 385 Fecha: 1990

18.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. Candela, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos

Título: Classical trajectory calculations for the $D+H_2(v=1, j=0) \rightarrow HD(v', j')+H$ reaction: differential and state-to-state cross sections in the 0.35-1.10 eV collision energy range

Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro

Clave: A Volumen: **169** Páginas, inicial: 243 final: 251 Fecha: 1990

19.

Autores (p.o. de firma): Q. Xun Xu, R. S. Mackay, F. J. Aoiz, M. A. Quesada, P. J. Grunberg, R. B. Bernstein

Título: Measurement of the translational energy dependence of the cross section for the reaction $Sr+CH_3I \rightarrow SrI+CH_3$ from 0.1 to 1.0 eV

Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro

- Clave: A Volumen: **176** Páginas, inicial: 499 final: Fecha: 1991
-
- 20.**
 Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos
 Título: Effects of translational, rotational and vibrational energy on the dynamics of the $D+H_2 \rightarrow HD+H$ exchange reaction
 Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro
 Clave: A Volumen: **94** Páginas, inicial: 7991 final: 8007 Fecha: 1991
-
- 21.**
 Autores (p.o. de firma): R. S. Mackay, Q. Xun Xu, F. J. Aoiz, R. B. Bernstein
 Título: Dependence of the reaction cross section on the collision energy in the reactions of $Sr+RX \rightarrow SrX+R$ ($R=C_2H_5, n-C_3H_7, t-C_4H_9$): effect of the alkyl group
 Ref. revista: J. Phys. Chem. Libro
 Clave: A Volumen: **95** Páginas, inicial: 8226 final: Fecha: 1991
-
- 22.**
 Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos
 Título: Classical collision complexes in the $D+H_2 \rightarrow HD+H$ reaction
 Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro
 Clave: A Volumen: **95** Páginas, inicial: 7767 final: 7768 Fecha: 1991
-
- 23.**
 Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos
 Título: Comment on energy requirements and energy disposal in the QCT study of the $D+H_2$ reaction. Comparison with quantum mechanical results
 Ref. revista: Faraday Discussions Chem. Soc. Libro
 Clave: A Volumen: **92** Páginas, inicial: 376 final: 379 Fecha: 1991
-
- 24.**
 Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, Q. Xun Xu, R. S. Mackay
 Título: Comment on excitation function of the $Sr+HI$ reaction
 Ref. revista: Faraday Discussions Chem. Soc. Libro
 Clave: A Volumen: **92** Páginas, inicial: 349 final: 351 Fecha: 1991
-
- 25.**
 Autores (p.o. de firma): Q. Xun Xu, R. S. Mackay, F. J. Aoiz, R. B. Bernstein
 Título: Translational energy dependence of the reaction cross sections: $Sr+CH_3I, CD_3I, CH_3Br$
 Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro
 Clave: A Volumen: **96** Páginas, inicial: 1896 final: 1991 Fecha: 1992
-
- 26.**
 Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, O. Puentedura, V. Sáez Rábanos
 Título: State-resolved differential cross sections for the $H+D_2(v=0, j) \rightarrow HD(v', j')+D$ reaction from quasiclassical trajectory calculations
 Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro
 Clave: A Volumen: **198** Páginas, inicial: 321 final: 327 Fecha: 1992
-
- *27.**
 Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos
 Título: Quasiclassical state-to-state cross sections for $D+H_2(v=0, j=0) \rightarrow HD(v', j')+H$. Formation and characteristics of short lived collision complexes
 Ref. revista: Journal of Chemical Physics Libro
 Clave: A Volumen: **97** Páginas, inicial: 7423 final: 7436 Fecha: 1992
-
- 28.-**
 Autores (p.o. de firma): R. Benito, F. J. Aoiz
 Título: Classical trajectory calculations of chemical reactions
 (si libro): Ref. revista: Libro: Capítulo en *Computational chemistry structure, Interactions on reactivity* (A, S. Fraga, Ed.)
 Clave: **CL** Volumen: Páginas, inicial: 562 final: 591 Fecha: 1992
 Editorial Elsevier. ISBN 0-444-885 12-9
 Lugar de publicación: New York
-

29.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, M. M. Nogueira, V. Sáez Rábanos

Título: Quasi-classical trajectory study of the $F+H_2(D_2)\rightarrow HF(DF)+H(D)$ reaction. Vibrationally state resolved integral and differential cross sections.Ref. revista: Chem. Phys. Lett. LibroClave: A Volumen: **204** Páginas, inicial: 359 final: 367 Fecha: 1993

30.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, M. M. Nogueira, V. Sáez Rábanos

Título: Quasi-classical trajectory study of a two ends reaction: $F+HD\rightarrow HF(DF)+D(H)$. Comparison of vibrationally state resolved integral and differential cross sections on three different potential surfacesRef. revista: Chem. Phys. Lett. LibroClave: A Volumen: **211** Páginas, inicial: 72 final: 81 Fecha: 1993

31.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. Brouard, P. A. Enriquez, R. Sayós

Título: Analysis of Doppler-broadened profiles generated from photoinitiated bimolecular reactions

Ref. revista: J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2 LibroClave: A Volumen: **89** Páginas, inicial: 1427 final: 1434 Fecha: 1993

32.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, O. Puentedura, V. Sáez Rábanos

Título: Angle-velocity contour maps for the $H+D_2\rightarrow HD+D$ reaction from quasiclassical trajectory calculationsRef. revista: J. Chem. Phys. LibroClave: A Volumen: **100** Páginas, inicial: 758 final: 759 Fecha: 1994

33.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, H. K. Buchenau, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos

Título: The $D+H_2(v=1,j)\rightarrow HD(v',j')+H$ reaction. A detailed quasiclassical trajectory studyRef. revista: J. Chem. Phys. LibroClave: A Volumen: **100** Páginas, inicial: 2789 final: 2799 Fecha: 1994

34.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos

Título: Short lived complexes in classical mechanics: the $D+H_2$ reactionRef. revista: Anales de Física LibroClave: A Volumen: **90** Páginas, inicial: 293 final: 298 Fecha: 1994

35.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos

Título: Classical dynamics calculations for the $F+H_2\rightarrow HF+H$ reaction on two recent potential energy surfacesRef. revista: Chem. Phys. Lett. LibroClave: A Volumen: **218** Páginas, inicial: 422 final: 432 Fecha: 1994

36.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, H.J. Werner

Título: Classical dynamics of the $F+H_2\rightarrow HF+H$ reaction on a new ab initio potential energy surface. A direct comparison with experimentRef. revista: Chem. Phys. Lett. LibroClave: A Volumen: **223** Páginas, inicial: 215 final: 226 Fecha: 1994

37.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero and V. Sáez Rábanos

Título: Energy dependence of the reaction cross section for the $F+H_2\rightarrow HF+H$ reaction from quasi-classical trajectory calculationsRef. revista: Chem. Phys. LibroClave: A Volumen: **187** Páginas, inicial: 227 final: 239 Fecha: 1994

38.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, M. J. D'Mello, V.J. Herrero, V. Sáez Rábanos, L. Schnieder, R.E. Wyatt

Título: Quantum mechanical and quasi-classical calculations for the $H+D_2\rightarrow HD+D$ reaction. Reaction probabilities and differential cross sectionsRef. revista: J. Chem. Phys. LibroClave: A Volumen: **101** Páginas, inicial: 5781 final: 5791 Fecha: 1994

39.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, H.-J. Werner

Título: A quasi-classical trajectory study of the $F+D_2 \rightarrow DF+D$ reaction on a new ab initio potential energy surface. A comparison with molecular beam experimental results

Ref. revista: J. Phys. Chem. Libro

Clave: A Volumen: **98** Páginas, inicial: 10665 final: 10670 Fecha: 1994

40.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, H.-J. Werner

Título: The $F+HD \rightarrow DF(HF)+H(D)$ reaction revisited. Quasi-classical trajectory study on an ab initio potential energy surface and comparison with molecular beam experiments

Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **102** Páginas, inicial: 9248 final: 9262 Fecha: 1995

***41.**

Autores (p.o. de firma): L. Schnieder, K. Seekamp-Rahn, J. Borkowski, E. Wrede, K. H. Welge, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. J. D'Mello, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, R.E. Wyatt

Título: Experimental studies and theoretical predictions for the $H+D_2 \rightarrow HD+D$ reaction

Ref. revista: **Science** Libro

Clave: A Volumen: **269** Páginas, inicial: 207 final: 210 Fecha: 1995

42.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: Effect of reagent vibrational excitation on the dynamics of the $Cl+HD \rightarrow HCl(DCl)+H(D)$ reaction

Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro

Clave: A Volumen: **247** Páginas, inicial: 232 final: 242 Fecha: 1995

43.

Autores (p.o. de firma): M. Faubel, B. Martínez-Haya, L. Y. Rusin, U. Tappe, J. P. Toennies, F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: F- D_2 state resolved reactive scattering at 180 meV and 240 meV collision energies I: A high resolution crossed molecular beam experiment

Ref. revista: Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **207** Páginas, inicial: 227 final: 243 Fecha: 1996

44.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Faubel, B. Martínez-Haya, L. Y. Rusin, U. Tappe, J. P. Toennies

Título: F- D_2 state resolved reactive scattering at 180 meV and 240 meV collision energies II: Quasi-classical cross sections. A comparison with the experimental results

Ref. revista: Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **207** Páginas, inicial: 245 final: 259 Fecha: 1996

45.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos

Título: Reaction cross section and rate constant calculations for the $D+H_2(v=0,1) \rightarrow HD+H$ reaction on three ab initio potential energy surfaces. A quasi-classical trajectory study

Ref. revista: J. Phys. Chem. Libro

46.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, K. Stark, H.-J. Werner

Título: "Reaction cross sections and rate constant calculations for the $F+H_2(D_2) \rightarrow HF(DF)+H(D)$ reactions from quasiclassical trajectory calculations on an ab initio potential energy surface."

Ref. revista: Chemical Physics Letters. Libro

Clave: A Volumen: **254** Páginas, inicial: 341 final: 348 Fecha: 1996

47.

Autores (p.o. de firma): A.J. Alexander, F. J. Aoiz, M. Brouard, J.P. Simons

Título: "Product state-resolved stereodynamics: quasiclassical trajectory study of the reaction $O(^1D)+HD \rightarrow OH(OD)(v',j')+D(H)$."

Ref. revista: Chemical Physics Letters Libro

Clave: A Volumen: **256** Páginas, inicial: 561 final: 568 Fecha: 1996

48.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. Brouard, P.A. Enríquez

Título: "Product rotational polarization in photon-initiated bimolecular reactions."

Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **105** Páginas, inicial: 4964 final: 4982 Fecha: 1996

49.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero

Título: "Quasiclassical trajectory study of the $H+D_2 \rightarrow HD+D$ reaction at a collision energy of 2.2 eV. A comparison with experimental results."

Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **105** Páginas, inicial: 6086 final: Fecha: 1996

50.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: "Reaction cross sections and rate constant calculations for the $Cl+H_2(D_2) \rightarrow HCl(DCl)+H(D)$ reactions from quasiclassical trajectory calculations on an ab initio potential energy surface."

Ref. revista: J. Phys. Chem. Libro

Clave: A Volumen: **100** Páginas, inicial: 18108 final: 18115 Fecha: 1996

***51.**

Autores (p.o. de firma): M. Alagia, N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia, E. H. van Kleef, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, D. W. Schwenke, T. C. Allison, S. L. Mielke, D. G. Truhlar

Título: Quantum, classical and experimental beam studies of the simplest Cl reaction

Ref. revista: **Science** Libro

Clave: A Volumen: **273** Páginas, inicial: 1519 final: 1522 Fecha: 1996

52.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, I. Tanarro, H.-J. Werner

Título: "The $F+HD$ reaction: Cross sections and rate constants on an ab initio potential energy surface."

Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro

Clave: A Volumen: **262** Páginas, inicial: 175 final: 182 Fecha: 1996

53.

Autores (p.o. de firma): A.J. Alexander, F. J. Aoiz, M. Brouard, I. Burak, Y. Fujimura, J. Short, J. P. Simons

Título: "An experimental and quasiclassical study of the product state resolved stereodynamics of the reaction: $O(^1D)+H_2(v=0, j=0, 1) \rightarrow OH(X^2\Pi_{3/2}; v'=0, N', f)+H$."

Ref. revista: Chemical. Physics Letters

Clave: A Volumen: **262** Páginas, inicial: 589 final: 597 Fecha: 1996

54.

Autores (p.o. de firma): E. Wrede, L. Schnieder, K. H. Welge, F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero

Título: High resolution study of the $H+D_2 \rightarrow HD+D$ reaction dynamics at a collision energy of 2.2 eV

Ref. revista: Chemical. Physics Letters

Clave: A Volumen: **265** Páginas, inicial: 129 final: 136 Fecha: 1997

55.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. Brouard, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark

Título: "Product rotational polarization. The stereodynamics of the $F+H_2$ reaction."

Ref. revista: Chemical. Physics Letters

Clave: A Volumen: **264** Páginas, inicial: 487 final: 494 Fecha: 1996

56.

Autores (p.o. de firma): E. Wrede, L. Schnieder, K. H. Welge, F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, V. Sáez Rábanos

Título: The $H+D_2$ reaction in the vicinity of the conical intersection

Ref. revista: J. Chem. Phys.

Clave: A Volumen: **106** Páginas, inicial: 7862 final: Fecha: 1997

57.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, I. Tanarro

Título: The $H+D_2 \rightarrow HD+D$ reaction. Quasiclassical trajectory study of cross sections, rate constants and kinetic isotope effect

Ref. revista: J. Phys. Chem. A Libro

Clave: A Volumen: **101** Páginas, inicial: 6165 final: 6176 Fecha: 1997

58.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, J. F. Castillo, D. E. Manolopoulos, K. Stark, H.-J. Werner

Título: An ab initio simulation of molecular beam experiments for the $F+H_2 \rightarrow HF+H$ reaction

Ref. revista: J. Phys. Chem. A

Clave: A Volumen: 101 Páginas, inicial: 6403 final: Fecha: 1997

59.

Autores (p.o. de firma): A. J. Alexander, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, J. Short, J. P. Simons

Título: "Stereodynamics of the reaction $O(^1D_2)+H_2(v=0) \rightarrow OH(X^2\Pi_i; v'=0, N', f)+H$: State-resolved linear and rotational angular momentum distributions."

Ref. revista: J. Phys. Chem. A Libro

Clave: A Volumen: 101 Páginas, inicial: 7544 final: 7557 Fecha: 1997

60.

Autores (p.o. de firma): A. J. Alexander, F. J. Aoiz, M. Brouard, J. Short, J. P. Simons

Título: "The state resolved stereodynamics of an insertion reaction."

Ref. revista: Isr. J. Chem. Libro

Clave: A Volumen: 37 Páginas, inicial: 317 final: 327 Fecha: 1997

61.

Autores (p.o. de firma): A. J. Alexander, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, V. J. Herrero, J. P. Simons

Título: "Classical reaction probabilities, cross sections and rate constants for the $O(^1D)+H_2 \rightarrow OH+H$ reaction."

Ref. revista: Chem. Phys. Lett. Libro

Clave: A Volumen: 278 Páginas, inicial: 313 final: 324 Fecha: 1997

62.

Autores (p.o. de firma): A. J. Alexander, D. A. Blunt, M. Brouard, J. P. Simons, F. J. Aoiz, L. Bañares, Y. Fujimura, M. Tsubouchi.

Título: " $O(^1D)+H_2 \rightarrow OH(v', N')+H$: The anatomy of a reaction."

Ref. revista: Faraday Discuss. Chem. Soc.

Clave: A Volumen: 108 Páginas, inicial: 375 final: 386 Fecha: 1997

63.

Autores (p.o. de firma): L. Bañares, F. J. Aoiz, V. J. Herrero, M. J. D'Mello, B. Niederjohann, K. Seekamp-Rahn, E. Wrede, L. Schnieder.

Título: "Experimental and quantum mechanical study of the $H+D_2$ reaction near 0.5 eV: the assessment of the H_3 potential energy surfaces."

Ref. revista: J. Chemical. Physics.

Clave: A Volumen: 108 Páginas, inicial: 6160 final: Fecha: 1998

64.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, B. Friedrich, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, J. E. Verdasco

Título: "Effect of pendular orientation on the reactivity of $H+DCI$: A quasiclassical trajectory study."

Ref. revista: Chemical Physics Letters.

Clave: A Volumen: 289 Páginas, inicial: 132 final: 140 Fecha: 1998

65.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero

Título: "Recent results on quasi-classical trajectory computations of elementary reactions."

Ref. revista: Faraday Research Article, J. Chem. Soc. Faraday Trans.

Clave: R Volumen: 94 Páginas, inicial: 2483 final: 2500 Fecha: 1998

66.

Autores (p.o. de firma): J. F. Castillo, B. Hartke, H.-J. Werner, F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya

Título: "Quantum mechanical and quasi-classical simulations of molecular beam experiments for the $F+H_2 \rightarrow HF+H$ reaction on two ab initio potential energy surfaces."

Ref. revista: Journal. Chemical Physics

Clave: A Volumen: 109 Páginas, inicial: 7224 final: 7237 Fecha: 1998

67.

Autores (p.o. de firma): M. Faubel, B. Martínez-Haya, L. Y. Rusin, U. Tappe, J. P. Toennies, F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: "Rotational state resolved differential cross sections for the reaction $F+D_2 \rightarrow DF+D$ at collision energies 140-240 meV."

Ref. revista: J. Phys. Chem. A

Clave: A Volumen: 102 Páginas, inicial: 8695 final: 8707 Fecha: 1998

68.

-
- Autores (p.o. de firma): . J. Aoiz, J. F. Castillo, L. Bañares
Título: Chemical Reaction Theory. General Discussion
Ref. revista: Faraday Discuss. Chem Soc.
Clave: A Volumen: **110** Páginas, inicial: 215 final: 217 Fecha: 1998
-
- 69.**
Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, J. F. Castillo, L. Bañares, B. Martínez-Haya
Título: Chemical Reaction Theory. General Discussion
Ref. revista: Faraday Discuss. Chem Soc.
Clave: A Volumen: **110** Páginas, inicial: 220 final: 222 Fecha: 1998
-
- 70.**
Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares
Título: Chemical Reaction Theory. General Discussion
Ref. revista: Faraday Discuss. Chem Soc.
Clave: A Volumen: **110** Páginas, inicial: 245 final: 246 Fecha: 1998
-
- 71.**
Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares
Título: Chemical Reaction Theory. General Discussion
Ref. revista: Faraday Discuss. Chem Soc.
Clave: A Volumen: **110** Páginas, inicial: 365 final: 365 Fecha: 1998
-
- 72.-**
Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero
Título: "Classical versus quantum mechanical calculations of the dynamics of elementary reactions: from state resolved cross sections to rate constants."
Ref. revista: Libro: Capítulo en *Advances in Classical Trajectory Methods Vol. III: Comparisons of Classical and Quantum Dynamics* (W. L. Hase, Ed)
Clave: CL Volumen: Páginas, inicial: 121 final: 182 Fecha: 1998
Editorial (si libro): JAI Press ISBN 0-7623-0445-6 Lugar de publicación: Connecticut, E.E.U.U.
-
- 73.**
Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. T. Martínez, M. Menéndez, V. Sáez Rábanos and E. Verdasco.
Título: "Quasiclassical trajectory study of the Li+HF→LIF+H reaction."
Ref. revista: Chemical Physics Letters
Clave: A Volumen: **299** Páginas, inicial: 25 final: 34 Fecha: 1999
-
- 74.**
Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, M. Menéndez and E. Verdasco.
Título: "Quantum mechanical and quasi-classical rate constant calculations for the O(³P)+HCl→OH+Cl."
Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics Libro
Clave: A Volumen: **1** Páginas, inicial: 1149 final: Fecha: 1999
-
- 75.**
Autores (p.o. de firma): F.J. Aoiz, T. Díez-Rojo, V.J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, L. Ramonat, I. Tanarro and E. Verdasco.
Título: "Low temperature rotational relaxation of N₂ studied with resonance enhanced multiphoton ionization."
Ref. revista: J. Phys. Chem. A. Libro
Clave: A Volumen: **103** Páginas, inicial: 823 final: 831 Fecha: 1999
-
- 76.**
Autores (p.o. de firma): E. Wrede, L. Schnieder, K. H. Welge, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, V. J. Herrero.
Título: "The dynamics of the hydrogen exchange reaction at 2.20 eV collision energy: experimental and theoretical differential cross sections."
Ref. revista: Journal of Chemical Physics
Clave: A Volumen: **110** Páginas, inicial: 9971 final: 9981 Fecha: 1999
-

77.

Autores (p.o. de firma): B. Martínez-Haya, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J. M. Launay.

Título: "Quantum mechanical and quasiclassical trajectory study of state-to-state differential cross section for the $F+D_2 \rightarrow DF+D$ reaction in the center-of-mass and laboratory frames."

Ref. revista: Phys. Chem. Chem. Phys.

Clave: A Volumen: 1 Páginas, inicial: 3415 final: 3427 Fecha: 1999

78.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, I. Tanarro, E. Verdasco

Título: "Reaction cross-sections for the $H+HCl(DCl)$ reaction: a quasiclassical trajectory study."

Ref. revista: Chem. Phys. Lett.

Clave: A Volumen: 306 Páginas, inicial: 179 final: 186 Fecha: 1999

79.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título: Spin orbit effects in quantum mechanical rate constant calculations for the $F+H_2 \rightarrow HF+H$ reaction

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: 111 Páginas, inicial: 4013 final: 4024 Fecha: 1999

80.

Autores (p.o. de firma): M. P. De Miranda, F. J. Aoiz, L. Bañares, V. Sáez Rábanos

Título: "A unified quantal and classical treatment of the stereodynamics of elementary reactions. The state-resolved $k-k'-j'$ vector correlation for the $H+D_2(v=0, j=0)$ reaction."

Ref. revista: J. Chem. Phys.

Clave: A Volumen: 111 Páginas, inicial: 5368 final: 5383 Fecha: 1999

81.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero

Título: A theoretical study of the dynamics of the $O(^1D)+HD$ reaction at 0.196 eV collision energy. Comparison with experimental results

Ref. revista: Chem. Phys. Lett.

Clave: A Volumen: 310 Páginas, inicial: 277 final: 286 Fecha: 1999

82.

Autores (p.o. de firma): B. Martínez-Haya, I. Zapater, P. Quintana, M. Menéndez, E. Verdasco, J. Santamaría, L. Bañares and F. J. Aoiz.

Título: Photodissociation of Dimethyl Sulfide at 227.5 nm: Resonance Enhanced Multiphoton Ionization of the Methyl Fragment.

Ref. revista: Chemical Physics Letters

Clave: A Volumen: 311 Páginas, inicial: 159 final: 166 Fecha: 1999

83.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, V. J. Herrero

Título: Comment on "Reaction cross sections for the $H+D_2(v=0,1)$ system for collision energies up to 2.5 eV: A multiconfiguration time-dependent Hartree wave-packet propagation study" [J. Chem. Phys. 110, 241 (1999)]

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: 111 Páginas, inicial: 9891 final: 9892 Fecha: 1999

84.

Autores (p.o. de firma): P. Casavecchia, L. Cartechini, F. J. Aoiz, M. Alagia, N. Balucani, G. G. Volpi, L. Bañares, D. W. Schwenke, T. C. Allison, S. L. Mielke, D. G. Truhlar

Título: Stereochemistry and control in molecular reaction dynamics. General Discussion

Ref. revista: Faraday Discuss. Chem Soc.

Clave: A Volumen: 113 Páginas, inicial: 206 final: 209 Fecha: 1999

85.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título: Stereochemistry and control in molecular reaction dynamics. General Discussion

Ref. revista: Faraday Discuss. Chem Soc. Libro

Clave: A Volumen: 113 Páginas, inicial: 209 final: 209 Fecha: 1999

86.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. P. de Miranda, L. Bañares

Título: Stereochemistry and control in molecular reaction dynamics. General Discussion

Ref. revista: Faraday Discuss. Chem Soc.

- Clave: A Volumen: **113** Páginas, inicial: 210 final: 214 Fecha: 1999
-
- 87.**
Autores (p.o. de firma): A. J. Alexander, R. N. Zare, F. J. Aoiz, S. A. Kandel, L. Bañares
Título: Stereochemistry and control in molecular reaction dynamics. General Discussion
Ref. revista: Faraday Discuss. Chem Soc.
Clave: A Volumen: **113** Páginas, inicial: 334 final: 336 Fecha: 1999
-
- 88.**
Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. Menéndez, V. Sáez Rábanos and E. Verdasco.
Título: Stereochemistry and control in molecular reaction dynamics. General Discussion
Ref. revista: Faraday Disc. Chem. Soc.
Clave: A Volumen: **113** Páginas, inicial: 338 final: 339 Fecha: 1999
-
- 89.**
Autores (p.o. de firma): S. A. Kandel, A. J. Alexander, Z.-H. Kim, R. N. Zare, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, V. Sáez Rábanos
Título: "Cl+HD(v=1;J=1,2) reaction dynamics: comparison between theory and experiment."
Ref. revista: Journal of Chemical Physics Libro
Clave: A Volumen: **112** Páginas, inicial: 670 final: 685 Fecha: 2000
-
- 90.**
Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, H. J. Loesch, M. Menéndez and F. Stienkemeier.
Título: Experimental and theoretical study of the Li+HF(v=1)→LiF+H reaction.
Ref. revista: Phys. Chem. Chem. Phys. Libro
Clave: A Volumen: **2** Páginas, inicial: 541 final: 548 Fecha: 2000
-
- 91.**
Autores (p.o. de firma): T. Martínez, M. L. Hernández, J. M. Alvaríño, A. Laganà, F. J. Aoiz, M. Menéndez, E. Verdasco
Título: Quasiclassical trajectory simulation of the O(¹D)+HCl→OH+Cl, ClO+H reactions on an improved potential energy surface.
Ref. revista: Phys. Chem. Chem. Phys. Libro
Clave: A Volumen: **2** Páginas, inicial: 589 final: 597 Fecha: 2000
-
- 92.**
Autores (p.o. de firma): A. J. Alexander, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, J. P. Simons
Título: Product rotational angular momentum polarization in the reaction O(¹D)+H₂→OH+H
Ref. revista: Phys. Chem. Chem. Phys. Libro
Clave: A Volumen: **2** Páginas, inicial: 571 final: 581 Fecha: 2000
-
- 93.**
Autores (p.o. de firma): M. Alagia, N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, T. C. Allison, S. L. Mielke, D. G. Truhlar
Título: "Dynamics of the Cl+H₂/D₂ reaction: A comparison of crossed molecular beam experiments with quasiclassical and quantum mechanical calculations."
Ref. revista: Phys. Chem. Chem. Phys. Libro
Clave: A Volumen: **2** Páginas, inicial: 599 final: 612 Fecha: 2000
-
- *94.**
Autores (p.o. de firma): F. Fernández-Alonso, B. D. Bean, J. D. Ayers, A. E. Pomerantz, R. Zare, F. J. Aoiz, L. Bañares
Título: "Evidence for scattering resonances in the H+D₂ reaction."
Ref. revista: **Angewante Chemie Int. Edition** Libro
Clave: A Volumen: **39** Páginas, inicial: 2748 final: 2752 Fecha: 2000
-
- 95.**
Autores (p.o. de firma): P. Quintana, R. F. Delmdahl, D. H. Parker, B. Martínez-haya, F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Verdasco
Título: "Velocity map imaging and REMPI study of the photodissociation of CH₃SCH₃ from the first absorption band."
Ref. revista: Chemical. Physics Letters
Clave: A Volumen: **325** Páginas, inicial: 146 final: 152 Fecha: 2000
-
- 96.**
Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, J. F. Castillo, V.J. Herrero
Título: The dynamics of the O(¹D)+HD reaction: A quasiclassical trajectory multisurface study
Ref. revista: J. Chem. Phys.
Clave: A Volumen: **113** Páginas, inicial: 5339 final: 5353 Fecha: 2000
-

97.

Autores (p.o. de firma): N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Menéndez, W. Bian and H.-J. Werner.

Título: "Dynamics of the Cl+D₂ reaction: a comparison of crossed molecular beam experiments with quasi-classical trajectory calculations on a new ab initio potential energy surface."

Ref. revista: Chemical Physics Letters

Clave: A Volumen: **328** Páginas, inicial: 500 final: 508 Fecha: 2000

98.

Autores (p.o. de firma): J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría

Título: "Quasi-classical trajectory study of the dynamics of the H+H₂O reaction: differential cross-sections and product rotational polarization."

Ref. revista: Chemical Physics Letters Libro

Clave: A Volumen: **329** Páginas, inicial: 517 final: 525 Fecha: 2000

99.

Autores (p.o. de firma): B. Martínez-Haya, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Quintana, E. Verdasco

Título: "Photodissociation of CD₃SCD₃ on the first absorption band: Translational and internal energy transfer to CD₃ fragment studied by resonant multiphoton ionization and time-of-flight spectroscopy."

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A Libro

Clave: A Volumen: **104** Páginas, inicial: 10150 final: Fecha: 2000

100.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Bohm, A. Hanf, V. J. Herrero, K.-H. Jung, A. Läufer, K.-W. Lee, M. Menéndez, V. Sáez Rábanos, I. Tanarro, H.-R. Volpp and J. Wolfrum.

Título: "Experimental and theoretical reaction cross sections for the H + HCl reaction. "

Ref. revista: J. Phys. Chem. A. Libro

Clave: A Volumen: **104** Páginas, inicial: 10452 final: Fecha: 2000

*101.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, M. Brouard, W. Denzer, C. Vallance, P. Honvault, J.-M. Launay, A. J. Dobbyn, P. J. Knowles

Título: Insertion and abstraction pathways in the reaction O(¹D)+H₂→OH+H

Ref. revista: **Phys. Rev. Lett.**

Clave: A Volumen: **86** Páginas, inicial: 1729 final: 1732 Fecha: 2001

102.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, M. P. de Miranda

Título: "The stereodynamics of the O(¹D)+HD reaction on the ground ¹A' and excited ¹A'' potential energy surfaces."

Ref. revista: J. Chem. Phys.

Clave: A Volumen: **114** Páginas, inicial: 8328 final: Fecha: 2001

103.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título:

"On the existence of resonances in the H+D₂→HD(v'=0,j'=7)+D reaction at collision energies 0.64-1.30 eV."

Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **114** Páginas, inicial: 8237 final: 8239 Fecha: 2001

104.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. T. Martínez, V. Sáez Rábanos

Título: Quasi-classical treatment of the Stereodynamics of chemical reactions: k-r-k' vector correlation for the Li+HF(v=1,j=1) → LiF+ H reaction

Ref. revista: J. Chem. Phys.

Clave: A Volumen: **114** Páginas, inicial: 8880 final: 8896 Fecha: 2001

105.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro and E. Verdasco.

Título: Low temperature rotational relaxation of N₂ in collisions with Ne.

Ref. revista: J. Phys. Chem. A. Libro

Clave: A Volumen: **105** Páginas, inicial: 6976 final: Fecha: 2001

106.

Autores (p.o. de firma): D. Skouteris, H.-J. Werner, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, M. Menéndez, N. Balucani, L. Cartechini and P. Casavecchia.

Título: "Experimental and theoretical differential cross sections for the reactions $\text{Cl}+\text{H}_2/\text{D}_2$."

Ref. revista: J. Chem. Phys.

Clave: Volumen: **114** Páginas, inicial: 10662 final: 10671 Fecha: 2001

107.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, M. Menéndez, D. Skouteris and H.-J. Werner.

Título: "A quantum mechanical and quasi-classical trajectory study of the $\text{Cl}+\text{H}_2$ reaction and its isotopic variants. Dependence of the integral cross section on the collision energy and reagent rotation."

Ref. revista: J. Chem. Phys. Libro

Clave: A Volumen: **115** Páginas, inicial: 2074 final: 2081 Fecha: 2001

108.

Autores (p.o. de firma): F. Fernández-Alonso, B. D. Bean, R. N. Zare, L. Bañares, F. J. Aoiz, J. F. Castillo

Título: "Forward scattering in the $\text{H}+\text{D}_2\rightarrow\text{HD}+\text{D}$ reaction: comparison between Photoloc experiments and theoretical predictions."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics Libro

Clave: A Volumen: 115 Páginas, inicial: 4534 final: 4544 Fecha: 2001

109.

Autores (p.o. de firma): F.J. Aoiz, L. Bañares, V.J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro and E. Verdasco.

Título: "Gas phase molecular relaxation at very low temperatures. A comparative study of N_2 and of its mixtures with He and Ne.

Ref. revista: Vacuum Libro

Clave: A Volumen: **64** Páginas, inicial: 417 final: 423 Fecha: 2002

110.

Autores (p.o. de firma): F.J. Aoiz, L. Bañares and J. F. Castillo.

Título: A quasi-classical trajectory study of the $\text{H}+\text{H}_2\text{O}\rightarrow\text{OH}+\text{H}_2$ reaction dynamics at 1.4 eV collision energy on a new ab initio potential energy surface

Ref. revista: Chemical Physics Letters Libro

Clave: A Volumen: **356** Páginas, inicial:120final: 126 Fecha: 2002

111.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, P. Honvault, J. M. Launay, X. Liu, J. J. Lin, S. A. Harich, C. C. Wang, and Xueming. Yang.

Título: "The $\text{O}(^1\text{D})+\text{H}_2$ reaction at 56 meV collision energy: a comparison between quantum mechanical, quasi-classical trajectory and crossed beam results."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **116** Páginas, inicial: 10692 final: 10703 Fecha: 2002

***112.**

Autores (p.o. de firma): N. Balucani, L. Cartechini, G. Capozza, E. Segoloni, P. Casavecchia, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J. M. Launay

Título: Quantum effects in the differential cross sections for the insertion reaction $\text{N}(^2\text{D})+\text{H}_2$.

Ref. revista: **Physical Review Letters** o

Clave: A Volumen: **89** Páginas, inicial :013201-1 final:013201-4 Fecha: 2002

113.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, D. Sokolovski

Título: Energy evolution of forward scattering in the $\text{H}+\text{D}_2\rightarrow\text{HD}(v'=3, j'=0)+\text{D}$ reaction.

Ref. revista: J. Chemical Physics

Clave: A Volumen: **117** Páginas, inicial: 2546 final:2556 Fecha: 2002

114.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya

Título: A quasiclassical trajectory and quantum mechanical study of the $\text{O}(^1\text{D})+\text{D}_2$ reaction dynamics. Comparison with high resolution molecular beam experiments.

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical . Physics

Clave: A Volumen: **117** Páginas, inicial:4379 final: 4385 Fecha: 2002

115.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares and J. F. Castillo, D. Sokolovski, F. Fernández-Alonso, B. D. Bean, J. D. Ayers, A. E. Pomerantz and R. N. Zare.

Título: "Observation of scattering resonances in the H+D₂ reaction: Direct probe of the HD₂ transition state geometry."

Ref. Libro: Capítulo en Femtochemistry and Femtobiology. Ultrafast Dynamics in Molecular Science. (A. Douhal and J. Santamaría, Eds)

Clave: **CL** Volumen: Páginas, inicial: 61 final: 72 Fecha: 2002

Editorial (si libro): World Scientific. ISBN 0-7623-0445-6 Lugar de publicación: New Jersey-Singapore-London-Hong Kong

116.

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, E. Verdasco.

Título: Low temperature rotational relaxation of N₂ in collisions with He.

Ref. revista: Chemical Physics Letters

Clave: A Volumen: **367** Páginas, inicial: 500 final: 506 Fecha: 2003

117.

Autores (p.o. de firma): L. Bañares, F. J. Aoiz, P. Honvault, B. Bussery-Honvault, J. M. Launay

Título: "Quantum mechanical and quasi-classical trajectory study of the C(¹D)+H₂ reaction dynamics."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **118** Páginas, inicial: 565 final: 568 Fecha: 2003

118.

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, I. Burak, D. Minayev, C. Vallance, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, D. H. Zhang, M. A. Collins

Título: The dynamics of the H+D₂O → OD+HD reaction at 2..5 eV: Experiment and theory.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics Libro

Clave: A Volumen: **118** Páginas, inicial: 1162 final: 1174 Fecha: 2003

***119.-**

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, I. Burak, D. Minayev, P. O'Keeffe, S. Marinakis, C. Vallance, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, D. H. Zhang, D. Xie, M. Yang, S.-Y. Lee, M. A. Collins

Título: "The cross-section for the H+H₂O abstraction reaction: experiment and theory."

Ref. revista: **Physical Review Letters** Libro

Clave: A Volumen: **90** Páginas, inicial: 093201-1 final: 093201-4 Fecha: 2003

120.-

Autores (p.o. de firma): J. F. Castillo, M. A. Collins, F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: "Quasi-classical trajectory study of the dynamics of the H+N₂O reaction on a new potential energy surface."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **118** Páginas, inicial: 7303 final: 7312 Fecha: 2003

121.-

Autores (p.o. de firma): S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría, E. Martínez-Nuñez, A. Fernández-Ramos

Título: Quasi-classical trajectory study of H₂ elimination in the photodissociation of difluoroethylenes at 193 nm.

Ref. revista: J. Chemical Physics Libro

Clave: A Volumen: **118** Páginas, inicial: 6941 final: 6945 Fecha: 2003

122.-

Autores (p.o. de firma): J. Barr, I. Torres, L. Bañares, J. E. Verdasco, F. J. Aoiz

Título: "Near UV photodissociation of CD₃SCD₃: CD₃ fragment (v,J) vector correlations."

Ref. revista: Chemical Physics Letters Libro

Clave: A Volumen: **373** Páginas, inicial: 550 al: 557 Fecha: 2003

123.-

Autores (p.o. de firma): L. Bañares, F. J. Aoiz, S. A. Vázquez, Tak-San Ho, Herschel Rabitz

Título: "Quasi-classical trajectory calculations on a fast analytic potential energy surface for the C(¹D)+H₂ reaction."

Ref. revista: Chemical Physics Letters Libro

Clave: A Volumen: **374** Páginas, inicial: 243 final: 251 Fecha: 2003

124.-

Autores (p.o. de firma): Tak-San Ho, Herschel Rabitz, F. J. Aoiz, L. Bañares, S. A. Vázquez, L. Harding

Título: "Implementation of a fast analytic ground state potential energy surface for the N(²D)+H₂ reaction."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **119** Páginas, inicial: 3063 final: 3070 Fecha: 2003

125.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, J. E. Verdasco, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, M. H. Alexander
Título: "Attractive and repulsive interactions in the inelastic scattering of NO+Ar. A comparison between classical trajectory and close-coupling quantum mechanical results."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics.

Clave: A Volumen: **119** Páginas, inicial: 5860 final: 5866 Fecha: 2003

126.-

Autores (p.o. de firma): Teresa Martínez, M.L. Hernández, J.M. Alvaríño, F.J. Aoiz and V. Sáez Rábanos

Título: A detailed study of the dynamics of the O(¹D)+HCl→OH+Cl, ClO+H reactions

Ref. revista: Journal of Chemical Physics Libro

Clave: A Volumen: **119** Páginas, inicial: 7871 final: 7886 Fecha: 2003

127.-

Autores (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: A direct classical trajectory study of HCl elimination from 193 nm photodissociation of vinyl chloride.

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry. A Libro

Clave: A Volumen: **107** Páginas, inicial: 7611 final: 7618 Fecha: 2003

128.-

Autores (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, M. N. D. S. Cordeiro, S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares.

Título: A direct classical trajectory study of the acetone photodissociation on the triplet surface.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics Libro

Clave: A Volumen: **119** Páginas, inicial: 10618 final: 10624 Fecha: 2003

129.-

Autores (p.o. de firma): L. Bañares, F.J. Aoiz, P. Honvault and J.M. Launay

Título: Dynamics of the S(¹D)+H₂ insertion reaction: A combined quantum mechanical and quasiclassical trajectory study.

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry Libro

Clave: A Volumen: **108** Páginas, inicial: 1616 final: 1628 Fecha: 2004

130.-

Autores (p.o. de firma): A. E. Pomerantz, F. Ausfelder, R. N. Zare, S. Althorpe, F.J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título: Disagreement between theory and experiment in the simplest chemical reactions: Collision energy

dependent rotational distributions for H+D₂→HD(v'=3,j')+D

Ref. revista: Journal of Chemical Physics Libro

Clave: A Volumen: **120** Páginas, inicial: 3244 final: 3254 Fecha: 2004

131.-

Autores (p.o. de firma): F. Ausfelder, A. E. Pomerantz, R. N. Zare, S. Althorpe, F.J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título: Collision energy dependence of the HD(v'=2) product rotational distribution of the H+D₂ reaction in the

range 1.30-1.89 eV.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics Libro

Clave: A Volumen: **120** Páginas, inicial: 3255 final: 3264 Fecha: 2004

132.-

Autores (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares, L. Bañares and J.F. Castillo

Título: "Further investigation of the HCl elimination in the photodissociation of vinyl chloride at 193 nm: A direct MP2/6-

31G(d,p) trajectory study."

Ref. revista: Chemical Physics Letters

Clave: A Volumen: **386** Páginas, inicial: 225 final: 232 Fecha: 2004

133.-

Autores (p.o. de firma): G. A. Amaral, I. Torres, G. A. Pino, F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: "Photodissociation dynamics of dimethyl sulfoxide-d₆ at 210 nm: Experimental evidence for a prompt anisotropic CD₃ channel."

Ref. revista: Chemical Physics Letters

Clave: A Volumen: **386** Páginas, inicial: 225 final: 232 Fecha: 2004

134.-

Autores (p.o. de firma): J. Barr, I. Torres, E. Verdasco, G. A. Pino, L. Bañares, F. J. Aoiz,

Título: "Photodissociation dynamics of dimethyl sulfide following excitation within the first absorption band."

- Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A Libro
Clave: A Volumen: **108** Páginas, inicial: 7936 final: 7948 Fecha: 2004
-
- 135.-**
Autores (p.o. de firma): G. A. Pino, I. Torres, G. A. Amaral, F. J. Aoiz, L. Bañares
Título: "UV Photodissociation dynamics of CD₃SOCD₃: Photofragment translational and internal energy distribution."
Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A Libro
Clave: A Volumen: **108** Páginas, inicial: 8048- final: 8057 Fecha: 2004
-
- 136.-**
Autores (p.o. de firma): I. Torres, J. Barr, E. Verdasco, L. Bañares, F. J. Aoiz,
Título: "Near UV photodissociation of dimethyl sulphide: a direct mechanism on the second absorption band."
Ref. revista: Chemical Physics Letters Libro
Clave: A Volumen: **394** Páginas, inicial: 307 final: 312 Fecha: 2004
-
- 137.-**
Autores (p.o. de firma): J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. A. Collins
Título: "The H+N₂O→OH+N₂ reaction dynamics on an interpolated QCISD potential energy surface. A quasiclassical trajectory study."
Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A
Clave: A Volumen: **108** Páginas, inicial: 6611 final: 6623 Fecha: 2004
-
- *138.-**
Autores (p.o. de firma): Marcelo P. de Miranda, and F. J. Aoiz
Título: Interpretation of quantum and classical angular momentum polarization moments.
Ref. revista: **Physical Review Letters**
Clave: A Volumen: **93** Páginas, inicial: 083201-1 final: 083201-4 Fecha: 2004
-
- 139.-**
Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos and J. E. Verdasco
Título: "Classical stereodynamics in Ar plus NO inelastic collisions."
Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics
Clave: A Volumen: **6** Páginas, inicial: 4407 final: 4415 Fecha: 2004
-
- 140.-**
Autores (p.o. de firma): A. E. Pomerantz, F. Ausfelder, R. N. Zare, J.C. Juanes-Marcos, S. Althorpe, V. Sáez-Rábanos, F.J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo
Título: Rovibrational product state distribution for inelastic H+D₂ collisions.
Ref. revista: Journal of Chemical Physics Libro
Clave: A Volumen: **121** Páginas, inicial: 6587 final: 6590 Fecha: 2004
-
- 141.-**
Autores (p.o. de firma): Marcelo P. de Miranda, F. J. Aoiz, V. Sáez-Rábanos, M. Brouard
Título: Spatial distributions of angular momenta in quantum and quasiclassical stereodynamics.
Ref. revista: Journal of Chemical Physics
Clave: A Volumen: **121** Páginas, inicial: 9830 final: 9843 Fecha: 2004
-
- 142.-**
Autores (p.o. de firma): Nadia Balucani, G. Capozza, L. Cartechini, A. Bergeat, R. Bobbenkamp, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, B. Bussery-Honvault and J. M. Launay.
Título: Dynamics of the insertion C(1D) + H₂: A comparison of crossed molecular beam experiments with quasiclassical trajectory and quantum mechanical scattering calculations.
Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics Libro
Clave: A Volumen: **6** Páginas, inicial: 4957 final: 4967 Fecha: 2004
-
- 143.-**
Autores (p.o. de firma): M. Brouard, S. Marinakis, L. Rubio Lago, F. Quadrini, D. Solaiman, C. Vallance, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo.
Título: "Cross sections for the H+H₂O→OH+H₂ and H+D₂→OD+HD abstraction reactions."
Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics
Clave: A Volumen: **6** Páginas, inicial: 4991 final: 4999 Fecha: 2004
-
- 144.-**
Autores (p.o. de firma): J. Klos, F. J. Aoiz, R. Cireasa, J. J. ter Meulen
Título: "Rotationally inelastic scattering of OH(2I1) by HCl(1Σ): Comparison of experiment and theory."
Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics Libro

Clave: A Volumen: 6 Páginas, inicial: 4968 final: 4974 Fecha: 2004

145.-

Autores (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, S. A. Vázquez, I. Borges Jr., A. B. Rocha, C. M. Estévez, J. F. Castillo, and F. J. Aoiz

Título: On the conformational memory in the photodissociation of formic acid.

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A Libro

Clave: A Volumen: 109 Páginas, inicial: 2836 final: 2839 Fecha: 2005

146.-

Autores (p.o. de firma): Nadia Balucani, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título: Dynamics of the O(¹D) + D₂ reaction: A comparison between crossed molecular beam experiments and quasiclassical trajectory calculations on the lowest three potential energy surfaces.

Ref. revista: Molecular Physics Libro

Clave: A Volumen: 103 Páginas, inicial: 1703 al: 1714 Fecha: 2005

***147.-**

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero

Título: The H+H₂ reactive system. Progress in the study of the dynamics of the simplest reaction.

Ref. revista: International Review on Physical Chemistry Libro

Clave: A Volumen: 24 Páginas, inicial: 119 final: 190 Fecha: 2005

148.-

Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, M. P. de Miranda, J. Haigh, B. Kendrick, V. Sáez-Rábanos and F. J. Aoiz

Título: How reactants polarization can be used to change and unravel chemical reactivity.

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: 109 Páginas, inicial: 6200 final: 6217 Fecha: 2005

149.-

Autores (p.o. de firma): Nadia Balucani, Giovanni Capozza, Enrico Segoloni, Andrea Russo, Rolf Bobbenkamp, Piergiorgio Casavecchia, Tomas Gonzalez-Lezana, Edward J. Rackham, Luis Banares, and F. Javier Aoiz

Título: "Dynamics of the C(¹D)+D₂ reaction: A comparison of crossed molecular beam experiments with quasi-classical trajectory and accurate statistical calculations."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: 122 Páginas, inicial: 234309-1 final : 234309-11 Fecha: 2005

150.-

Autores (p.o. de firma): Jiri Vanicek, W. H. Miller, J. F. Castillo and F. J. Aoiz

Título: Quantum instanton evaluation of the kinetic isotope effects.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: 123 Páginas, inicial: 054108-1 final : 054108-14 Fecha: 2005

151.-

Autores (p.o. de firma): R. Bobbenkamp, A. Paladini, A. Russo, H. J. Loesch, M. Menéndez, E. Verdasco, F. J. Aoiz and H.-J. Werner.

Título: Effect of rotational energy on the reaction Li+HF(v=0, j) → LiF+H: An experimental and computational study.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: 122 Páginas, inicial: 244304-1 final: 244304-18 Fecha: 2005

152.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. Sáez Rábanos, B. Martínez-Haya and T. González-Lezana

Título: Quasiclassical determination of reaction probabilities as a function of the total angular momentum.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: 123 Páginas, inicial: 0941901-1 final :0941901-14 Fecha: 2005

153.-

Autores (p.o. de firma): J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Fernández-Ramos, S. Vázquez.

Título: Quasiclassical trajectory study of the F+CH₄ reaction dynamics on a dual-level interpolated potential energy surface.

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: 109 Páginas, inicial: 8459 final :8470 Fecha: 2005

154.-

Autores (p.o. de firma): G. A. Amaral, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, G. A. Pino, I. Tanarro, I. Torres, J. E. Verdasco.

Título: "Low-temperature rotational relaxation of CO in self collisions and in collisions with Ne and He."

- Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A
Clave: A Volumen: **109** Páginas, inicial: 8459 final: 8470 Fecha: 2005
-
- 155.-**
Autores (p.o. de firma): L. Bañares, F. J. Aoiz, T. González-Lezana, V. J. Herrero, I. Tanarro.
Título: "Influence of rotation and isotope effects on the dynamics of the $N(2D)+H_2$ reactive system and of its deuterated variants."
Ref. revista: Journal of Chemical Physics
Clave: A Volumen: **123** Páginas, inicial: 224301-1 final : 224301-9 Fecha: 2005
-
- 156.-**
Autores (p.o. de firma): L. Bañares, F. J. Aoiz, V. J. Herrero
Título: Latest findings on the dynamics of the simplest chemical reaction.
Ref. revista: Physica Scripta
Clave: A Volumen: **73** Páginas, inicial: C6 final: C13 Fecha: 2006
-
- 157.-**
Autores (p.o. de firma): E. Martínez-Núñez, S. Vázquez, F. J. Aoiz, and J. F. Castillo
Título: "Quasiclassical Trajectory study of the collision-induced dissociation dynamics of $Ar + CH_3SH^+$ using an ab initio interpolated potential energy surface."
Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A
Clave: A Volumen: **110** Páginas, inicial: 1225 final: 1231 Fecha: 2006
-
- 158.-**
Autores (p.o. de firma): P. Honvault, B. Bussery-Honvault, J.-M. Launay, F. J. Aoiz, and L. Bañares
Título: "Quantum mechanical and quasiclassical trajectory scattering calculations for the $C(1D)+H_2$ reaction on the second excited $1^1A'$ potential energy surface."
Ref. revista: Journal of Chemical Physics
Clave: A Volumen: **124** Páginas, inicial: 154314-1 final: 154314-7 Fecha: 2006
-
- 159.-**
Autores (p.o. de firma): T. González-Lezama, O. Roncero, P. Honvault, J.-M. Launay, N. Bulut, F. J. Aoiz, and L. Bañares
Título: A detailed quantum mechanical and quasiclassical trajectory study on the dynamics of the $H^++H_2 \rightarrow H_2+H^+$ exchange reaction.
Ref. revista: Journal of Chemical Physics
Clave: A Volumen: **125** Páginas, inicial: 094314-1 final: 094314- 16 Fecha: 2006
-
- 160.-**
Autores (p.o. de firma): J. G. Izquierdo, G. Amaral, F. Ausfelder, F. J. Aoiz and L. Bañares.
Título: "Velocity map imaging study of the photodissociation of CH_3SH at 205 nm. Internal energy distribution of the SH fragment."
Ref. revista: ChemPhysChem
Clave: A Volumen: **7** Páginas, inicial: 1682 final: 1686 Fecha: 2006
-
- 161.-**
Autores (p.o. de firma): J. F. Castillo, F. J. Aoiz and L. Bañares.
Título: "Quasiclassical trajectory study of the $Cl+CH_4$ reaction dynamics on a QCISD interpolated potential energy surface."
Ref. revista: Journal of Chemical Physics
Clave: A Volumen: **125** Páginas: 124316-1 final: 124316-10 Fecha: 2006
-
- 162.-**
Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. Brouard, C. J. Eyles, J. F. Castillo, and V. Sáez Rábanos.
Título: Cumulative reaction probabilities: A comparison between quasiclassical and quantum mechanical results.
Ref. revista: Journal of Chemical Physics Clave: A Volumen: **125** Páginas: 144105-1 final: 144105-12 Fecha: 2006
-
- 163.-**
Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, J. M. Alvarino, M. P. de Miranda, V. Sáez Rábanos and F. J. Aoiz.
Título: "Mechanism and control of the $F+H_2$ reaction at low and ultralow collision energies."
Ref. revista: Journal of Chemical Physics
Clave: A Volumen: **125** Páginas: 133104-1 final: 133104-9 Fecha: 2006
-
- 164.-**
Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, J. M. Alvarino, B. K. Kendrick, V. Sáez Rábanos, M. P. de Miranda and F. J. Aoiz.
-

Título: "Analysis of the H+D₂ reaction mechanism through consideration of the intrinsic reactant polarisation."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: 8 Páginas: 4881 final: 4896 Fecha: 2006

***165.-**

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, L. Bañares and V. J. Herrero

Título: The Dynamics of Insertion Reactions of H₂ Molecules with Excited Atoms.

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A (Feature Article)

Clave: A Volumen: 110 Páginas: 12546 final: 12565 Fecha: 2006

***166.-**

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. Sáez Rábanos, T. González-Lezana and D. E. Manolopoulos

Título: "A statistical quasiclassical trajectory model for atom-diatom insertion reactions."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics (Communication)

Clave: A Volumen: 126 Páginas: 161101-1 final: 161101-5 Fecha: 2007

***167.-**

Autores (p.o. de firma): J. Klos, F. J. Aoiz, J. E. Verdasco, M. Brouard, S. Marinakis, S. Stolte

Título: "Fully quantum state resolved inelastic scattering between He and NO(X²Π)".

Ref. revista: Journal of Chemical Physics (Communication) Libro

Clave: A Volumen: 127 Páginas: 031102-1 final: 031102-4 Fecha: 2007 D.O.I. 10.1063/1.2756826

168.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, M. P. de Miranda and V. Sáez Rábanos

Título: "Constraints at the transition state of the D+H₂ reaction: quantum bottlenecks vs. stereodynamics."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: 9 Páginas: 5367-5373: Fecha: 2007 D.O.I. 10.1039/b709161c

169.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, T. González-Lezana and V. Sáez Rábanos

Título: A stringent test of the statistical quasiclassical trajectory model for the H₃⁺ exchange reaction: A comparison with rigorous statistical quantum mechanical results.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: 127 Páginas: 174109 -1 final: 174109 -15 Fecha: 2007 D.O.I. 10.1063/1.2774982

170.-

Autores (p.o. de firma): Jesús Aldegunde, F. J. Aoiz, V. Sáez Rábanos, B. K. Kendrick, and M. P. de Miranda

Título: "The canonical and other mechanisms of elementary chemical reactions."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: 9 Páginas: 5794-5808 Fecha: 2007 D.O.I. 10.1039/b707190f

171.-

Autores (p.o. de firma): N. Bulut, J.F. Castillo, F. J. Aoiz and L. Bañares

Título: Real wave packets and quasiclassical trajectory studies of the H⁺ + HLi reaction.

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: 10 Páginas: 821-827 Fecha: 2008 D.O.I. 10.1039/b712625e

172.-

Autores (p.o. de firma): E. Carmona-Novillo, T. Gonzalez-Lezana, O. Roncero, P. Honvault, J.-M. Launay, N. Bulut, F. Javier Aoiz, L. Banares, A. Trottier, and E. Wrede

Título: "On the dynamics of the H⁺ + D₂ (v=0, j=0) → HD + D⁺ reaction: A comparison between theory and experiment."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: 128 Páginas: 014304-1—014304-15 Fecha: 2008 D.O.I.: 10.1063/1.2812555

173.-

Autores (p.o. de firma): Jesús Aldegunde, F. Javier Aoiz, and Marcelo P. de Miranda

Título: "Quantum mechanical limits to the control of atom-diatom chemical reactions through the polarisation of the reactants."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **10** Páginas: 1139-1150 Fecha: 2008 D.O.I.: 10.1039/b716482c

174.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, V. J. Herrero, and V. Sáez Rábanos.

Título: "Cumulative reaction probabilities and transition state properties: A study of the F+H₂ reaction and its deuterated isotopic variants."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **129** Páginas 024305-1--024305-9 Fecha: 2008 D.O.I.: 10.1063/1.2952672

175.-

Autores (p.o. de firma): J. Klos, M. H. Alexander, M. Brouard, C. J. Eyles, and F. J. Aoiz

Título: A new potential energy surface for OH(A ²Σ)-Ar: The van der Waals complex and scattering dynamics.

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **129** Páginas: 054301-1—054301-12 Fecha: 2008 D.O.I.: 10.1063/1.2957745

176.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, T. González-Lezama, and V. Sáez-Rábanos.

Título: "A comparison of quantum and quasiclassical statistical models for reactions of electronically excited atoms with molecular hydrogen".

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **129** Páginas: 094305-1, 094305-12 Fecha: 2008 D.O.I.: 10.1063/1.2969812

***177.-**

Autores (p.o. de firma): P.G. Jambrina, J. Aldegunde, J. F. Castillo, F. J. Aoiz, V. Sáez-Rábanos.

Título: "Vibrationally inelastic collisions of H+D₂. A comparison of quantum mechanical, quasi-classical and experimental results".

Ref. revista: Journal of Chemical Physics (Communication)

Clave: A Volumen: **130**, Páginas: 031102-1, 031102-4 Fecha: 2009 D.O.I 10.1063/1.3065668

178.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, M. Brouard, C. J. Eyles, J. Klos, and M. P. de Miranda.

Título: "The collisional depolarization of ²S+1Σ radicals by closed shell atoms: Theory and application to OH(A ²Σ⁺)+Ar".

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **130**, Páginas: 044305-1, 044305-12 Fecha: 2009 D.O.I.: 10.1063/1.3061496.

179.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, A. Bryant, Y.-P. Chang, R. Cireasa, C. J. Eyles, A. M. Green, S. Marinakis, F. J. Aoiz, and J. Klos.

Título: "Collisional depolarization of OH(A) with Ar: Experiment and theory".

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **130**, Páginas: 044306-1, 044306-13 Fecha: 2009 D.O.I.10.1063/1.3061551.

180.-

Autores (p.o. de firma): Pablo G. Jambrina, F. J. Aoiz, Chris Eyles, Victor Herrero, and Vicente Sáez-Rábanos

Título: "Cumulative reaction probabilities and transition state properties: A study of the H⁺ + H₂ and H⁺ + D₂ proton exchange reactions".

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **130**, Páginas: 184303-1--184303-10 Fecha: 2009 D.O.I.: 10.1063/1.3129343

181.-

Autores (p.o. de firma): T. González-Lezana, P. Honvault, P. G. Jambrina, F. J. Aoiz, and J.-M. Launay

Título: "Effects of the rotational excitation of D₂ and of the potential energy surface on the H⁺+D₂ → HD+D⁺ reaction".

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **131**, Páginas: 044315 Fecha: 2009 D.O.I.

182.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, H. Chadwick, Y.-P. Chang, R. Cireasa, C. J. Eyles, A. O. La Via, N. Screen, F. J. Aoiz, and J. Klos.

Título: "Collisional depolarization of NO(A) by He and Ar studied by quantum beat spectroscopy".

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: 131, Páginas: 104307 Fecha: 2009 D.O.I:10.1063/1.3212608

183.-

Autores (p.o. de firma): P. Bargaño, P. G. Jambrina, J. M. Alvario, M. L. Hernández, F. J. Aoiz, M. Menéndez, E. Verdasco, and T. Gonzalez-Lezana.

Título: "The dynamics of the $O(^1D)+HCl \rightarrow OH+Cl$ reaction at 0.26 eV collision energy: A comparison between theory and experiment".

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: 113, Páginas: 14237-14250 Fecha: 2009 DOI: 10.1021/jp902336s

184.-

Autores (p.o. de firma): N. Bulut, J. F. Castillo, L. Bañares, and F. J. Aoiz

Título: "Quantum Mechanical Wave Packet and Quasiclassical Trajectory Calculations for the $Li + H_2^+$ Reaction".

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: 113, Páginas: 14657-14663 Fecha: 2009 DOI: 10.1021/jp904429e

185.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz and J. E. Verdasco, M. Brouard, J. Klos, S. Marinakis, and S. Stolte

Título: "Inelastic Scattering of He Atoms and $NO(X^2\Pi)$ Molecules: The Role of Parity on the Differential Cross Section".

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: 113, Páginas: 14636-14649 Fecha: 2009. DOI: 10.1021/jp9043732

186.-

Autores (p.o. de firma): M. L. Costen, R. Livingstone, K. G. McKendrick and G. Paterson, M. Brouard, H. Chadwick, Y.-P. Chang, C. J. Eyles, F. J. Aoiz, and J. Klos.

Título: "Elastic Depolarization of $OH(A)$ by He and Ar: A Comparative Study"

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: 113, Páginas: 15156-15170 Fecha: 2009 DOI: 10.1021/jp905348c

187.-

Autores (p.o. de firma): P. G. Jambrina, F. J. Aoiz, N. Bulut, S. C. Smith, G. G. Balint-Kurti, and M. Hankel.

Título: "The dynamics of the H^+D_2 reaction: A comparison of quantum mechanical wavepacket, quasi-classical and statistical-quasi-classical results."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: 12 Páginas: 1102-1115 Fecha: 2010 DOI: 10.1039/b919914d

188.-

Autores (p.o. de firma): M. Agúndez, J. Cernicharo, M. Guélin, C. Kahane, E. Roue, J. Klos, F. J. Aoiz, F. Lique, N. Marcelino, J. R. Goicoechea, M. González García, C. A. Gottlieb, M. C. McCarthy, and P. Thaddeus.

Título: "Astronomical identification of CN^- , the smallest observed molecular anion".

Ref. revista: Astronomy and Astrophysics

Clave: A Volumen: 517 Páginas: L2/1-5 Fecha: 2010 DOI:10.1051/0004-6361/201015186

189.-

Autores (p.o. de firma): N. Balucani, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, J.-M. Launay, B. Bussery-Honvault, P. Honvault.

Título: "Dynamics of the $C(^1D)+H_2$ reaction. A comparison of crossed molecular beam experiments with quantum mechanical and quasiclassical trajectory calculations on the first two singlet ($1^1A'$ and $1^1A''$) potential energy surfaces".

Ref. revista: Molecular Physics

Clave: A Volumen: 108 Páginas: 373-380 Fecha: 2010 DOI: 10.1080/00268970903476696

190.-

Autores (p.o. de firma): P. G. Jambrina, J. M. Alvario, F. J. Aoiz, V. J. Herrero, and V. Sáez-Rábanos.

Título: "Reaction dynamics of the D^++H_2 reaction: A comparison of theoretical approaches".

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: 12 Páginas: 12591-12603 Fecha: 2010 DOI: 10.1039/c0cp00311e

191.-

Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, P. G. Jambrina, V. Sáez-Rábanos, M. P. De Miranda, and F. J. Aoiz.

Título: "Quantum mechanical mechanisms of inelastic and reactive $H+D_2(v=0, j=2)$ collisions."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: 12 Páginas: 13626-13636 Fecha: 2010 DOI:10.1039/c0cp00596g

192.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz and M. P. De Miranda.

Título: "Stereodynamics: Orientation and alignment in Chemistry". Chpt. 9 in "Tutorials in Reaction Dynamics". Eds. M. Brouard, and C. Vallance. Royal Society of Chemistry, Cambridge (2010)

Clave: **CL** Volumen: Páginas: 278-332 Fecha: 2010 ISBN: 978-0-85404-158-9

193.-

Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, P. G. Jambrina, M. P. De Miranda, V. Sáez-Rábanos, and F. J. Aoiz.

Título: "Stereodynamics of the F+HD (v=0,j=1) reaction: direct vs. resonant mechanisms."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **13** Páginas: 8345-8358 Fecha: 2011 DOI: 10.1039/c0cp02457k

194.-

Autores (p.o. de firma): P. Bargaño, P. G. Jambrina, J. M. Alvariño, M. Menéndez, E. Verdasco, M. Hankel, S. C. Smith, F. J. Aoiz, and T. González-Lezana.

Título: "Energy dependent dynamics of the O(¹D)+HCl reaction".

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **13** Páginas: 8502-8514 Fecha: 2011 DOI: 10.1039/c0cp02619k

195.-

Autores (p.o. de firma): J. F. Castillo, F. J. Aoiz, and B. Martínez-Haya.

Título: "Theoretical study of the dynamics of the Cl+O₃ reaction I. *Ab initio* potential energy surface and quasiclassical trajectory results."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **13** Páginas: 8537-8548 Fecha: 2011 DOI: 10.1039/c0cp02793f

196.-

Autores (p.o. de firma): P. G. Jambrina, E. García, Victor Herrero, Vicente Sáez-Rábanos, and F. J. Aoiz.

Título: "Can quasiclassical trajectory calculations reproduce the extreme kinetic isotope effect observed in the muonic isotopologues of the H + H₂ reaction?"

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **135**, Páginas: 034310-1 a 034310-6 Fecha: 2011 D.O.I. 10.1063/1.3611400

197.-

Autores (p.o. de firma): L. González-Sánchez, J. Aldegunde, P. G. Jambrina, and F. J. Aoiz.

Título: "Dynamical regimes on the Cl+H₂ collisions: Inelastic rainbow scattering."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **135** Páginas: 064301-1 a 064301-10 Fecha: 2011 DOI:10.1063/1.3618721

198.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, H. Chadwick, C. J. Eyles, F. J. Aoiz, and J. Klos.

Título: "The *k-j-j'* vector correlation in inelastic and reactive scattering".

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **135**, Páginas: 084305-1 a 084305-13. Fecha: 2011 DOI:10.1063/1.3625637

199.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, H. Chadwick, Y.-P. Chang, C. J. Eyles, F. J. Aoiz, and J. Klos.

Título: "Collisional angular momentum depolarization of OH(A) and NO(A) by Ar: A comparison of mechanisms."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **135**, Páginas: 084306-1 a 084306-17 Fecha: 2011 DOI:10.1063/1.3625638

***200.-**

Autores (p.o. de firma): C. J. Eyles, M. Brouard, C.-H. Yang, J. Klos, F. J. Aoiz, A. Gijbetsen, A. E. Wisekerke, and S. Stolte.

Título: "Interference structures in the differential cross-sections for inelastic scattering of NO+Ar"

Ref. revista: **Nature Chemistry**

Clave: A Volumen: **3**, Páginas: 597-602 Fecha: 2011 DOI: 10.1038/NCHEM.1071

201.-

Autores (p.o. de firma): S. Marinakis, B. J. Howard, F. J. Aoiz, and J. Klos.

Título: "Product rotational alignment in NO(X) + Kr collisions."

Ref. revista: Chemical Physics Letters

Clave: A Volumen: **512**, Páginas: 161-166 Fecha: 2011 DOI: 10.1016/j.cplett.2011.07.011

202.-

Autores (p.o. de firma): M. Lara, P. G. Jambrina, A. J. C. Varandas, J.-M. Launay, and F. J. Aoiz.

Título: "On the role of dynamical barriers in barrierless reactions at low energies."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **135** Páginas: 134313-1 134313-14 Fecha: 2011 DOI:10.1063/1.3644337

203.-

Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, F. J. Aoiz, L. González_Sánchez P. G. Jambrina, M. P. de Miranda, and V. Sáez-Rábanos.

Título: "Orientation effects in Cl+H₂ inelastic collisions: characterization of the mechanisms"

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **14** Páginas: 2911-2920. Fecha: 2012 DOI: 10.1039/c2cp23252a

204.-

Autores (p.o. de firma): P. G. Jambrina, J. M. Alvaríño, D. Gerlich, M. Hankel, V. J. Herrero, and V. Sáez-Rábanos, and F. J. Aoiz.

Título: "Dynamics of the D⁺+ H₂ and H⁺ + D₂ reactions: A detailed comparison between theory and experiment."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **14** Páginas: 3346-3359 Fecha: 2012 DOI:10.1039/C2CP23479C

205.-

Autores (p.o. de firma): Emine Aslan, Niyazi Bulut, Jesús F. Castillo, L. Bañares, O. Roncero, and F. J. Aoiz.

Título: "Accurate Time Dependent Wave Packet Study of the Li+H₂⁺ reaction and its isotopic variants."

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: **116** Páginas: 132-138. Fecha: 2012 DOI: 10.1021/jp210254t

206.-

Autores (p.o. de firma): C. J. Eyles, M. Brouard, H. Chadwick, B. Hornung, B. Nichols, C.-H. Yang, J. Klos, F. J. Aoiz, A. Gijbetsen, A. E. Wisekerke, and S. Stolte.

Título: "Fully Λ -doublet resolved state-to-state differential cross-sections for the inelastic scattering of NO(X) with Ar."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **14**, Páginas: 5403-5419 Fecha: 2012 DOI: 10.1039/c2cp23258h

207.-

Autores (p.o. de firma): C. J. Eyles, M. Brouard, H. Chadwick, F. J. Aoiz, J. Klos, X. Zhang, A. Gijbetsen, and S. Stolte.

Título: "The effect of parity conservation on the spin-orbit conserving and spin-orbit changing differential cross sections for the inelastic scattering of NO(X) by Ar."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **14**, Páginas: 5420-5439 Fecha: 2012 DOI: 10.1039/c2cp23259f

208.-

Autores (p.o. de firma): R. Pérez de Tudela, F. J. Aoiz, Y. Suleimanov, and David Manolopoulos.

Título: "Chemical Reaction Rates from Ring Polymer Molecular Dynamics: Zero Point Energy Conservation in Mu+H₂→MuH+H."

Ref. revista: The Journal of Physical Chemistry Letters

Clave: A Volumen: **3** Páginas: 493-497 Fecha: 2012 DOI:10.1021/jz201702q

209.-

Autores (p.o. de firma): Pablo G. Jambrina, Jacek Klos, F. Javier Aoiz and Marcelo P. de Miranda.

Título: "New findings regarding the NO angular momentum orientation in Ar—NO(X²I) collisions."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **14** Páginas: 9826-9837 Fecha: 2012 DOI: 10.1039/C2CP41043E

210.-

Autores (p.o. de firma): P. G. Jambrina, J. Aldegunde, M. P. de Miranda, V. Sáez-Rábanos and F. J. Aoiz.

Título: "Three-vector correlation in statistical reactions: the role of the triatomic parity"

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **14** Páginas: 9977-9987 Fecha: 2012 DOI: 10.1039/C2CP41049D

***211.-**

Autores (p.o. de firma): Justin Jankunas, Richard N. Zare, Foudhil Bouakline, Stuart C. Althorpe, Diego Herrez-Aguilar, F. J. Aoiz.

Ttulo: "Seemingly Anomalous Angular Distributions in H + D₂ Reactive Scattering."

Ref. revista: **Science**

Clave: A Volumen: **336** Pginas: 1687-1690 Fecha: 2012 DOI: 0.1126/science.1221329

212.-

Autores (p.o. de firma): Jacek Klos, F. J. Aoiz, M. Menndez, M. Brouard, H. Chadwick, and C. J. Eyles.

Ttulo: "Ab Initio studies of the interaction potential for the Xe–NO(X²I) van der Waals complex: Bound states and fully quantum and quasi-classical scattering. New findings regarding the NO angular momentum orientation in Ar–collisions."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **137** Pginas: 014312 (01-14) Fecha: 2012 DOI: 10.1063/1.4731286

***213.-**

Autores (p.o. de firma): Zahra Homayoon, Pablo G. Jambrina, F. Javier Aoiz, and Joel M. Bowman.

Ttulo: "Communication: Rate coefficients from quasiclassical trajectory calculations from the reverse reaction: The Mu+H₂ reaction re-visited."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics (Communication)

Clave: A Volumen: **137** Pginas: 021102 (1-4) Fecha: 2012 DOI: 10.1063/1.4734316

214.-

Autores (p.o. de firma): E. Garca, F. J. Aoiz, and A. Lagan.

Ttulo: "A classical versus quantum mechanics study of the OH+CO → H + CO₂ (J=0) reaction."

Ref. revista: Theoretical Chemistry Accounts

Clave: A Volumen: **131** Pginas: 1262 (1-11) Fecha: 2012 DOI: 10.1007/s00214-012-1262-3

215.-

Autores (p.o. de firma): Aditya N. Panda, Diego Herrez-Aguilar, Pablo G. Jambrina, Jess Aldegunde, Stuart C. Althorpe and F. Javier Aoiz.

Ttulo: "A state-to-state dynamical study of the Br + H₂ reaction: comparison of quantum and classical trajectory results."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **14** Pginas: 13067-13075 Fecha: 2012 DOI: 10.1039/C2CP41825H

216.-

Autores (p.o. de firma): P. G. Jambrina, E. Garca, V. J. Herrero, V. Sez-Rbanos, and F. J. Aoiz.

Ttulo: "Dynamics of the reactions of muonium and deuterium atoms with vibrationally excited hydrogen molecules: tunneling and vibrational adiabaticity."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **14** Pginas: 14596-14604 Fecha: 2012 DOI: 10.1039/C2CP42130E

***217.-**

Autores (p.o. de firma): E. Aslan, N. Bulut, J. F. Castillo, L. Baares, F. J. Aoiz, and O. Roncero.

Ttulo: "Accurate time-dependent wave packet study of the H⁺+LiH reaction at early universe conditions."

Ref. revista: The Astrophysical Journal.

Clave: A Volumen: **759** Pginas: 31 (6pp) Fecha: 2012 DOI: 10.1088/0004-637X/759/1/31

***218.-**

Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, D. Herrez-Aguilar, P. G. Jambrina, F. J. Aoiz, J. Jankunas, and R. N. Zare

Ttulo: "H + D₂ Reaction Dynamics in the Limit of Low Product Recoil Energy".

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry Letters

Clave: A Volumen: **3(20)** Pginas: 2959-2963 Fecha: 2012 DOI: 10.1021/jz301192f217

219.-

Autores (p.o. de firma): H. Chadwick, M. Brouard, Y.-P. Chang, C. J. Eyles, T. Perkins, S. A. Seamons, J. Klos, M. H. Alexander, and F. J. Aoiz

Ttulo: "A new potential energy surface for OH(A²Σ⁺)–Kr: The van der Waals complex and inelastic scattering"

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **137** Pginas: 154305 Fecha: 2012 DOI: 10.1063/1.4757859

220.-

Autores (p.o. de firma): Pablo G. Jambrina, M. Lara, M. Menéndez, J.-M. Launay, and F. J. Aoiz.

Título: "Rate coefficients from quantum and quasi-classical cumulative reaction probabilities for the S(¹D) + H₂ reaction."

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **137** Páginas: 164314 Fecha: 2012 DOI: 10.1063/1.4761894

221.-

Autores (p.o. de firma): P. G. Jambrina, I. Montero, F. J. Aoiz, J. Aldegunde, and J. M. Alvaríño

Título: "Elucidation of the O(¹D) + HF → F + OH mechanism by means of quasiclassical trajectories."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **14** Páginas: 16338-16348 Fecha: 2012 DOI: 10.1039/c2cp42287e

222.-

Autores (p.o. de firma): Yury V. Suleimanov, Ricardo Pérez de Tudela, Pablo G. Jambrina, Jesús F. Castillo, Vicente Sáez-Rábanos, David E. Manolopoulos, and F. Javier Aoiz

Título: "A ring polymer molecular dynamics study of the isotopologues of the H + H₂ reaction."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **15** Páginas: 3655-3665 Fecha: 2013 DOI: 10.1039/c2cp44364c

223.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, H. Chadwick, C. J. Eyles, B. Hornung, Nichols, F. J. Aoiz, P. G. Jambrina, and S. Stolte

Título: "Rotational alignment effects in NO(X) + Ar inelastic collisions: An experimental study"

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **138** Páginas: 104310-1/104310-13 Fecha: 2013 DOI: 10.1063/1.4792159

224.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, H. Chadwick, C. J. Eyles, B. Hornung, B. Nichols, F. J. Aoiz, P. G. Jambrina, Stolte, and M. P. de Miranda.

Título: "Rotational alignment effects in NO(X) + Ar inelastic collisions: An theoretical study"

Ref. revista: Journal of Chemical Physics

Clave: A Volumen: **138** Páginas: 104309-1/104309-15 Fecha: 2013 DOI: 10.1063/1.4792158

225.-

Autores (p.o. de firma): L. González-Sánchez, J. Aldegunde, P. G. Jambrina, and F. J. Aoiz.

Título: "Reaction Dynamics and Mechanism of the Cl + HD(v = 1) Reaction: A Quantum Mechanical Study"

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: **117** Páginas: 7030-7041 Fecha: 2013 DOI: 10.1021/jp312758r

226.-

Autores (p.o. de firma): D. Herráez-Aguilar, J. Aldegunde, V. Sáez-Rábanos, M. P. de Miranda, and F. J. Aoiz.

Título: "The reactive collision mechanism evinced: stereodynamical control of the elementary Br+H₂→H+HBr reaction"

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **15** Páginas: 13513 – 13522 Fecha: 2013 DOI: 10.1039/c3cp51271a.

227.-

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, H. Chadwick, C. J. Eyles, B. Hornung, B. Nichols, J. M. Scott, F. J. Aoiz, J. Klos, S. Stolte and X. Zhang.

Título: "The fully quantum state-resolved inelastic scattering of NO(X) + Ne: experiment and theory"

Ref. revista: Molecular Physics

Clave: A Volumen: **111** Páginas: 1759– 1771 Fecha: 2013 DOI: 10.1080/00268976.2013.783940.

228.-

Autores (p.o. de firma): J. Aldegunde, P.G. Jambrina, E. García, V.J. Herrero, V. Sáez-Rábanos and F.J. Aoiz.

Título: "**Topical Review:** Understanding the reaction between muonium atoms and hydrogen molecules: zero point energy, tunnelling, and vibrational adiabaticity"

Ref. revista: Molecular Physics

Clave: A Volumen: **111** Páginas: 3169 – 3181 Fecha: 2013 DOI: 10.1080/00268976.2013.815399.

***229.-**

Autores (p.o. de firma): M. Brouard, B. Hornung, and F. J. Aoiz

Título: "Origin of collision- induced molecular orientation "

Ref. revista: Physical Review Letters

Clave: A Volumen: **111** Páginas: 183202 (1-4) Fecha: 2013 DOI: 10.1103/PhysRevLett.111.183202

230.-

Autores (p.o. de firma): Julia H. Lehman, Marsha I. Lester, Jacek Klos, Millard H. Alexander, Paul J. Dagdigian, Diego Herraéz-Aguilar, F. Javier Aoiz, Mark Brouard, Helen Chadwick, Tom Perkins, Scott A. Seamons

Título: "Electronic Quenching of OH A $^2\Sigma^+$ Induced by Collisions with Kr Atoms"

Ref. revista: Journal of Physical Chemistry A

Clave: A Volumen: **117** Páginas: 13481 Fecha: 2013 DOI: 10.1021/jp407035p

231.-

Autores (p.o. de firma): F. J. Aoiz, J. Aldegunde, V. J. Herrero, V. Sáez-Rábanos

Título: "Comparative dynamics of the two channels of the reaction of D+MuH"

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **16** Páginas: (Advanced) Fecha: 2014 DOI: 10.1039/C3CP53908C.

232.-

Autores (p.o. de firma): R. Pérez de Tudela, Y. V. Suleimanov, M. Menéndez, J. F. Castillo and F. J. Aoiz

Título: "A ring polymer molecular dynamics study of the Cl+O₃ reaction."

Ref. revista: Physical Chemistry Chemical Physics

Clave: A Volumen: **16** Páginas: 2920-2927 Fecha: 2014 DOI: 10.1039/C3CP54405B.

233.-

Autores (p.o. de firma): H. Chadwick, M. Brouard, Y.-Pin Chang, C. Eyles, G. McCrudden, T. Perkins, S. Seamons, J. Klos, M. H. Alexander, Paul Dagdigian, Diego Herraéz-Aguilar, and F. J. Aoiz

Título: "The collisional depolarization of OH(A $^2\Sigma^+$) and NO(A $^2\Sigma^+$) with Kr."

Ref. revista: Journal Chemical Physics

Clave: A Volumen: **140** Páginas: 054306-1—054306-14 Fecha: 2014 DOI: 10.1063/1.4863446

***234.-**

Autores (p.o. de firma): Justin Jankunas, Mahima Sneha, Richard N. Zare, Foudhil Bouakline, Stuart C. Althorpe, Diego Herraéz-Aguilar, and F. J. Aoiz.

Título: "Perspective - Physical Sciences – Chemistry: Is the simplest chemical reaction really so simple?"

Ref. revista: Proceedings of the National Academic of Sciences (PNAS)

Clave: A Volumen: **111** (1) Páginas: 15-20 Fecha: 2014 DOI: 10.1073/pnas.1315725111
(Journal Impact factor 9.737)

235.-

Autores (p.o. de firma): H. Chadwick, M. Brouard, T. Perkins, and F. J. Aoiz

Título: "Collisional depolarisation in electronically excited radicals."

Ref. revista: International Reviews in Physical Chemistry

Clave: A Volumen: Páginas: Fecha: 2014 DOI: 10.1080/0144235X.2014.891855

Estancias en Centros extranjeros

(estancias continuadas superiores a un mes)

CLAVE: D = doctorado, P = postdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras (especificar).

Centro: Department of Chemistry. University of Columbia

Localidad: Nueva Cork

País E.E.U.U

Fecha: 1/1/1981-31/12/1982

Duración: 2 años

Tema: Haces moleculares y Química del láser

Clave: P

Centro: Department of Chemistry. University of California at Los Angeles (UCLA)

Localidad: Los Angeles

País E.E.U.U

Fecha: 1/5/1991-1/10/1991

Duración (semanas): 24

Tema: Dinámica de reacciones químicas con haces moleculares y detección por ionización multifotónica

Clave: I

Centro: Physical and Theoretical Chemistry Laboratory. Oxford University

Localidad: Oxford

País: Reino Unido

Fecha: 1/5/1995-1/10/1995

Duración (semanas): 24

Tema: Reacciones químicas fotoiniciadas con láseres

Clave: I

Centro: Department of Chemistry. Physical and Theoretical Chemistry Laboratory. Oxford University

Localidad: Oxford

País: Reino Unido

Fecha: 15/9/2005- 31/7/2006

Duración: 10,5 meses

Tema: Experimental and theoretical studies of reaction dynamics in gas phase.

Clave: I (En estancia de año sabático)

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Contribuciones a Congresos

1.

Autores: A. González Ureña, F. J. Aoiz, F. L. Tabarés
Título: Modelo dinámico de moléculas esféricas para reacciones químicas bimoleculares
Tipo de participación: Comunicación oral
Congreso: 75 Aniversario de R.S.E.F.Q., Simposio 27
Publicación:
Lugar celebración: Madrid Fecha: Octubre de 1978

2.

Autores: A. González Ureña, F. J. Aoiz, F. L. Tabarés, V. Sáez Rábanos, V. J. Herrero
Título: Construcción y puesta a punto de una máquina de haces moleculares
Tipo de participación: Comunicación oral
Congreso: 75 Aniversario de R.S.E.F.Q., Simposio 27
Publicación:
Lugar celebración: Madrid Fecha: Octubre de 1978

3.

Autores: A. González Ureña, V. J. Herrero, F. J. Aoiz, V. Sáez Rábanos, F. L. Tabarés
Título: Angular momentum conservation in reactive collisions cross sections for the alkali atom-alkyl iodide reactions
Tipo de participación: Poster
Congreso: Faraday Discussions Chem. Soc.
Publicación:
Lugar celebración: Birmingham, Reino Unido Fecha: Abril 1979

4.

Autores: A. González Ureña, V. J. Herrero, F. J. Aoiz, V. Sáez Rábanos
Título: Dispersión reactiva de yoduro potásico en las reacciones $K+C_2H_5I(CH_3) \rightarrow KI+C_2H_5(CH_3)$ a 0.39 eV
Tipo de participación: Poster
Congreso: 3º Encuentro Nacional de Química
Publicación:
Lugar celebración: Coimbra, Portugal Fecha: Abril 1980

5.

Autores: F. J. Aoiz, V. J. Herrero, A. González Ureña
Título: Molecular beam studies of $K+C_2H_5X(X=I,Br) \rightarrow KX+C_2H_5$ systems
Tipo de participación: Comunicación oral
Congreso: 3º European Study Conference on Low Energy Molecular Collisions. Molec III
Publicación:
Lugar celebración: Oxford, Inglaterra Fecha: Septiembre 1980

6.

Autores: V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, F. L. Tabares, A. González Ureña
Título: Differential reaction cross section of the $K+C_2H_5X(X=I,Br) \rightarrow KX+C_2H_5$ systems
Tipo de participación: Poster
Congreso: VIII International Symposium on Molecular Beams
Publicación:
Lugar celebración: Cannes, Francia Fecha: Abril 1981

7.

Autores: V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, V. J. Herrero, E. Verdasco, A. González Ureña
Título: Molecular beam study of the radical group effect in the $K+RI \rightarrow KI+R$ reactive collisions
Tipo de participación: Comunicación oral
Congreso: 9th International Symposium on Gas Kinetics
Publicación:
Lugar celebración: Burdeos, Francia Fecha: 20-25 Julio 1986

8.

Autores: E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, F. J. Aoiz, A. González Ureña
Título: Reaction dynamics of translational and electronic excitation in $Ca(^3P)+SF_6$ collisions
Tipo de participación: Comunicación oral
Congreso: XI International Symposium on Molecular Beams
Publicación:
Lugar celebración: Edimburgo, Reino Fecha: Julio 1987

9.

Autores: F. J. Aoiz, V. J. Herrero
Título: Trajectory calculations for the $D+H_2(v=1) \rightarrow DH+D$ reaction: effect of translation and rotation on reactivity in the post-threshold region
Tipo de participación: Poster
Congreso: III European Conference on Atomic and Molecular Physics
Publicación:
Lugar celebración: Burdeos, Francia Fecha: Abril 1989

10.

Autores: F. J. Aoiz
Título: Excitation functions of $Sr+CH_3X$ reactions
Tipo de participación: Conferencia invitada
Congreso: Nato Advanced Research Workshop on Dynamical Stereochemistry
Publicación:
Lugar celebración: Santa Cruz, E.E.U.U Fecha: Noviembre 1990

11.

Autores: F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos
Título: QCT study of the $D+H_2 \rightarrow HD+H$ reaction. Influence of rotational, vibrational and translational energy on the reactivity
Tipo de participación: Poster
Congreso: XIII International Symposium on Molecular Beams
Publicación:
Lugar celebración: El Escorial, España Fecha: 2-7 de Junio de 1991

12.

Autores: F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos
Título: Quasiclassical state resolved cross sections for the reaction $D+H_2(v=0, j=0) \rightarrow HD(v', j')+H$ reaction. Evidence for classical collision complexes
Tipo de participación: Poster
Congreso: XIV International Symposium on Molecular Beams
Publicación:
Lugar celebración: Asilomar, Pacific Grove. E.E.U.U Fecha: 7-12 Junio 1992

13.

Autores: F. J. Aoiz, V. J. Herrero, M. Nogueira, V. Sáez Rábanos

Título: The $F+H_2 \rightarrow HF+H$ reaction and its isotopic variants. New quasiclassical trajectory calculations on different potential energy surfaces

Tipo de participación: Poster

Congreso: XV International Symposium on Molecular Beams

Publicación:

Lugar celebración: Berlin. Alemania

Fecha: 16-21 Mayo 1993

14.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, H.-J. Werner

Título: Classical dynamics of the $F+H_2 \rightarrow HF+H$ reaction and its isotopic variants on recent semi-empirical and ab initio potential energy surfaces. A direct comparison with experimental results

Tipo de participación: Poster

Congreso: Gordon Conference on Atomic and Molecular Interactions

Publicación:

Lugar celebración: New London, New Hampshire, E.E.U.U.

Fecha: 3-8 Julio 1994

15.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, K. Stark, H.-J. Werner

Título: The $F+H_2 \rightarrow HF+H$ reaction dynamics from quasi-classical trajectory calculations on a ab initio potential energy surface. A comparison with experimental results

Tipo de participación: Poster

Congreso: 10th European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC)

Publicación:

Lugar celebración: Salamanca, España

Fecha: Agosto 1994

16.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, M. J. D'Mello, V.J. Herrero, O. Puentedura, V. Sáez Rábanos. R.E. Wyatt

Título: Quasi-classical trajectory and quantum mechanical study of the $H+D_2 \rightarrow HD+D$ reaction. Comparison with laser-molecular beam experiments

Tipo de participación: Poster

Congreso: 10th European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC)

Publicación:

Lugar celebración: Salamanca, España

Fecha: Agosto 1994

17.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos

Título: Quasi-classical trajectory study of the two ends reaction $F+HD \rightarrow HF(DF)+D(H)$ on an ab initio potential energy surface. Comparison with molecular beam experiments

Tipo de participación: Poster

Congreso: Stereodynamics and Active Control in Chemical Reactions

Publicación:

Lugar celebración: Orsay-Gif sur Yvette, Francia

Fecha: 12-15 Diciembre 1994

18.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Alagia, N. Balucani, P. Casavecchia, E. H. van Kleef, G.G. Volpi

Título: Dynamics of the $Cl+H_2(D_2)$ reactions. A comparison between molecular beam experiments and quasi-classical trajectory calculations on a new ab initio potential energy surface

Tipo de participación: Poster

Congreso: Stereodynamics and Active Control in Chemical Reactions

Publicación:

Lugar celebración: Orsay-Gif sur Yvette, Francia

Fecha: 12-15 Diciembre 1994

*19.

Autores: F. J. Aoiz

Título: D+H₂ QCT rate constants. A comparison with quantum mechanical results

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: CCP6 Conference on Reaction Dynamics

Publicación:

Lugar celebración: Nottingham, Reino Unido

Fecha: August 1995

20.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: Effect of the vibrational excitation on the Cl+HD→HCl(DCl)+D(H) reaction

Tipo de participación: Poster

Congreso: 8th European Workshop on Molecular Spectroscopy and Photon induced Dynamics

Publicación:

Lugar celebración: Oxford, Gran Bretaña

Fecha: 3-7 Septiembre 1995

21.

Autores: T. Díez-Rojo, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Menéndez, P. Quintana y E. Verdasco, V. J. Herrero e I. Tanarro, y V. Sáez Rábanos.

Título: Espectroscopia de ionización multifotónica resonante (REMPI). Puesta a punto y primeros resultados.

Tipo de participación: Comunicación oral.

Congreso: XV Reunión Nacional de Espectroscopia.

Publicación:

Lugar celebración: Oviedo, España.

Fecha: 15-20 Septiembre 1996

22.

Autores: A. Alexander, F. J. Aoiz, M Brouard, I. Burak, Y. Fujimura, J.P. Short, J. P. Simons

Título: The Ins and Outs of Collision Complexes

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: Stereo Dynamics of Chemical Reactions.

Publicación:

Lugar celebración: Bielefeld, Alemania

Fecha: 1-5 Diciembre 1996

23.

Autores: F. J. Aoiz

Título: Stereodynamics of simple chemical reactions: Quasi-classical trajectory determination and analysis of the angular momentum polarization

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: Stereo Dynamics of Chemical Reactions.

Publicación:

Lugar celebración: Bielefeld, Alemania

Fecha: 1-5 Diciembre 1996

24.

Autores: F. J. Aoiz, M. Menéndez and E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, B. Berning and H.-J. Werner, and H.J. Loesch.

Título: Influence of the rotational and translational energy on the reaction cross-section for Li+HF reaction on a new ab initio potential energy surface. A comparison with experimental results.

Tipo de participación: Poster

Congreso: Stereo Dynamics of Chemical Reactions.

Publicación:

Lugar celebración: Bielefeld, Alemania

Fecha: 1-5 Diciembre 1996

25.

Autores: A. Alexander, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, J. P. Simons

Título: Two and three vector correlations in the dynamics of some elementary reactions

Tipo de participación: Poster

Congreso: Stereo Dynamics of Chemical Reactions.

Publicación:

Lugar celebración: Bielefeld, Alemania

Fecha: 1-5 Diciembre 1996

26.

Autores: M. Alagia, N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia, E. H. van Kleef, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, D. W. Schwenke, T. C. Allison, S. L. Mielke, D. G. Truhlar

Título: Dynamics of the simplest chlorine atom reaction: an experimental and theoretical study

Tipo de participación: Poster

Congreso: Stereo Dynamics of Chemical Reactions.

Publicación:

Lugar celebración: Bielefeld, Alemania

Fecha: 1-5 Diciembre 1996

27.

Autores: F. J. Aoiz

Título: Comparison of QCT-QM theory for some elementary reactions with an emphasis on the calculation of $k(T)$

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: Gas Kinetics Discussion Group of the Royal Society of Chemistry: Theory and Experiment in Chemical Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Londres, Gran Bretaña

Fecha: 3 Enero 1997

28.

Autores: F. J. Aoiz

Título: Quantal and classical stereodynamics of elementary chemical reactions

Tipo de participación: Conferencia invitada (Key Lecture)

Congreso: 9th European Workshop on Molecular Spectroscopy and Photon induced dynamics (PHID9)

Publicación:

Lugar celebración: Toulouse, Francia

Fecha: 7-11 Noviembre 1997

29.

Autores: A. J. Alexander, F. J. Aoiz, L. Bañares, D. A. Blunt, M. Brouard, Y. Fujimura, J. P. Simons

Título: $O(^1D)+H_2 \rightarrow OH(v',N')+H$: The anatomy of a reaction

Tipo de participación: Poster

Congreso: 9th European Workshop on Molecular Spectroscopy and Photon induced dynamics (PHID9)

Publicación:

Lugar celebración: Toulouse, Francia

Fecha: 7-11 Noviembre 1997

30.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: Classical and quantal dynamics of elementary reactions

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: III Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics

Publicación:

Lugar celebración: Mira, Portugal

Fecha: 4-7 Mayo 1998

31.

Autores: F. J. Aoiz, M. Menéndez, E. Verdasco and V. Sáez Rábanos.

Título: The Dynamics of the Li+HF reaction. Quasiclassical trajectory studies on several potential energy surfaces and comparison with experimental results.

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: III Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics

Publicación:

Lugar celebración: Mira, Portugal

Fecha: 4-7 Mayo 1998

32.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares

Título: Classical and quantal dynamics of elementary reactions

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: Workshop on Computational Chemistry

Publicación:

Lugar celebración: Miraflores, Madrid, España

Fecha: 18-20 Junio 1998

33.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, E. Verdasco

Título: A quasi-classical trajectory study of the O+H₂/D₂ reactions: cross sections and rate constants

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: 15th International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Bilbao, España

Fecha: 6-12 Septiembre 1998

34.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero

Título: The assessment of the H₃ ab initio potential energy surfaces. State resolved differential cross sections versus thermal rate constants

Tipo de participación: Poster

Congreso: 15th International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Bilbao, España

Fecha: 6-12 Septiembre 1998

35.

Autores: B. Niederjohann, K. Seekamp-Rahn, E. Wrede, L. Schnieder, L. Bañares, F. J. Aoiz, M. J. D'Mello, V.J. Herrero

Título: Assessment of the H₃ potential energy surfaces: experimental and quantum mechanical results for the H+D₂→HD+D reaction at low collision energies

Tipo de participación: Poster

Congreso: 12th European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC XII)

Publicación:

Lugar celebración: Bristol, Inglaterra

Fecha: 6-11 Septiembre 1998

36.

Autores: E. Wrede, L. Schnieder, K. H. Welge, F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, J. F. Castillo, V.J. Herrero

Título: The Hydrogen exchange reaction at high energies: experimental and theoretical cross sections and the influence of the geometric phase effect

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: 12th European Conference on Dynamics of Molecular Collisions (MOLEC XII)

Publicación:

Lugar celebración: Bristol, Inglaterra

Fecha: 6-11 Septiembre 1998

37.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, V.J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, J. E. Verdasco

Título: Espectroscopía de ionización multifotónica resonante (REMPI) de radicales y moléculas

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: XVI Reunión Nacional de Espectroscopía

Publicación:

Lugar celebración: Sevilla, España

Fecha: 20-25 Septiembre 1998

38.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, V.J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, L. Ramonat, I. Tanarro, J. E. Verdasco

Título: Relajación molecular en expansiones supersónicas de nitrógeno

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVI Reunión Nacional de Espectroscopía

Publicación:

Lugar celebración: Sevilla, España

Fecha: 20-25 Septiembre 1998

39.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, V.J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, E. Verdasco

Título: Low temperature rotational relaxation of N₂ and N₂-He mixtures in free jets studied by resonance enhanced multiphoton ionization

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVIII Symposium on Molecular Beams

Publicación:

Lugar celebración: Ameland, Holanda

Fecha: 30 Mayo-4 Junio 1999

40.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, E. Verdasco, I. Zapater

Título: Photodissociation of dimethyl sulfide at 220-230 nm studied by 2+1 resonance enhanced multiphoton ionization of the CH₃ radical in a molecular beam

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVIII Symposium on Molecular Beams

Publicación:

Lugar celebración: Ameland, Holanda

Fecha: 30 Mayo-4 Junio 1999

41.

Autores: M. Alagia, N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia, E. H. van Kleef, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, D. W. Schwenke, T. C. Allison, S. L. Mielke, D. G. Truhlar

Título: The reaction Cl+H₂: A crossed molecular beam, quasiclassical trajectory and quantum mechanical scattering study

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Asis, Italia

Fecha: 20-25 Junio 1999

42.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título: Spin-orbit effects in quantum mechanical rate constant calculations for the F+H₂→HF+H reaction

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Asis, Italia

Fecha: 20-25 Junio 1999

43.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, V. J. Herrero

Título: The dynamics of the O(¹D)+HD reaction studied by the quasi-classical trajectory surface hopping method on new ab initio potential energy surfaces. Simulation of Doppler-selected time-of-flight measurements

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Asis, Italia

Fecha: 20-25 Junio 1999

44.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, V. J. Herrero, B. Niederjohann, E. Wrede, K. Seekamp-Rahn, L. Schnieder, K. H. Welge

Título: The assessment of the H₃ ab initio potential energy surfaces. State-resolved differential cross sections versus thermal rate constants

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Asis, Italia

Fecha: 20-25 Junio 1999

45.

Autores: B. Niederjohann, E. Wrede, K. Seekamp-Rahn, L. Schnieder, K. H. Welge, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, V. J. Herrero

Título: The hydrogen exchange reaction: experimental and theoretical cross sections and the influence of the geometrical phase effect

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Asis, Italia

Fecha: 20-25 Junio 1999

46.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, T. Díez-Rojo, V.J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, E. Verdasco

Título: Low temperature rotational relaxation of N₂ and N₂-He, Ne, Ar mixtures in free jets studied by resonance enhanced multiphoton ionization

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Asis, Italia

Fecha: 20-25 Junio 1999

47.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Menéndez

Título: Quasi-classical trajectory study of the Cl+H₂,D₂,HD reactions: cross sections and rate constants

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Asis, Italia

Fecha: 20-25 Junio 1999

48.

Autores: J. M. Alvaríño, F. J. Aoiz, M. L. Hernández, A. Laganà, T. Martínez, M. Menéndez, E. Verdasco

Título: Quasiclassical dynamics and stereodynamics of the O(¹D)+HCl reaction

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVI International Conference on Molecular Energy Transfer (COMET XVI)

Publicación:

Lugar celebración: Asis, Italia

Fecha: 20-25 Junio 1999

49.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título: Study of spin-orbit effects in the F+H₂ reaction from quantum mechanical rate constant calculations

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: 5th Workshop on Quantum Reactive Scattering

Publicación:

Lugar celebración: Perugia, Italia

Fecha: 25-27 Junio 1999

50.

Autores: B. Martínez-Haya, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J. M. Launay

Título: QM and QCT studies of state-to-state differential cross sections for the F+D₂ reaction

Tipo de participación: Poster

Congreso: 5th Workshop on Quantum Reactive Scattering

Publicación:

Lugar celebración: Perugia, Italia

Fecha: 25-27 Junio 1999

51.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, M. P. de Miranda, V. Sáez Rábanos

Título: Quantal and classical treatments of the stereodynamics of elementary chemical reactions: State resolved k-k'-j' vector correlations

Tipo de participación: Poster

Congreso: Faraday Discussions 113. Stereochemistry and control in molecular reaction dynamics

Publicación:

Lugar celebración: Leeds, Reino Unido

Fecha: 5-7 Julio 1999

52.

Autores: F. J. Aoiz

Título: Classical and quantal stereodynamics of elementary reactions

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: J. P. Simons. A celebratory meeting of dynamics and spectroscopy

Publicación:

Lugar celebración: Oxford, Reino Unido

Fecha: 13-14 Septiembre 1999

53.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, E. Verdasco, I. Zapater

Título: Photodissociation of dimethyl sulfide at 220-230 nm studied by 2+1 resonance enhanced multiphoton ionization of the CH₃ radical in a molecular beam

Tipo de participación: Poster

Congreso: J. P. Simons. A celebratory meeting of dynamics and spectroscopy

Publicación:

Lugar celebración: Oxford, Reino Unido

Fecha: 13-14 Septiembre 1999

54.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, C. Vallance, W. Denzer, M. Brouard, P. Honvault, J.-M. Launay

Título: Quantum mechanical, quasiclassical trajectory and experimental studies of the O(¹D)+H₂O(v=4,j')+H reaction

Tipo de participación: Poster

Congreso: DYNAM 2000. La dynamique chimique à l'aube du nouveau millénaire

Publicación:

Lugar celebración: Arcachon, Francia

Fecha: 31 Mayo-3 Junio 2000

55.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Brouard, J. F. Castillo, V. J. Herrero, P. Honvault, J.-M. Launay

Título: A quasiclassical trajectory surface hopping and quantum mechanical study of the dynamics of the O(1D)+H₂, HD reactions on new ab initio potential energy surfaces. A comparison with experimental results

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: 16th International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Cambridge, Reino Unido

Fecha: 23-27 Julio 2000

56.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, M. Menéndez, V. Sáez Rábanos, I. Tanarro, E. Verd

Título: Quasiclassical trajectory study of the Cl+H₂ and H+HCl reactions and their isotopic variants on a new ab initio potential energy surface

Tipo de participación: Poster

Congreso: 16th International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Cambridge, Reino Unido

Fecha: 23-27 Julio 2000

57.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, E. Verdasco

Título: Low temperature rotational relaxation of N₂ and of mixtures of N₂ with He and Ne in free jets studied by resonance enhanced multiphoton ionization

Tipo de participación: Poster

Congreso: 16th International Symposium on Gas Kinetics

Publicación:

Lugar celebración: Cambridge, Reino Unido

Fecha: 23-27 Julio 2000

58.

Autores: B. Martínez-Haya, P. Quintana, F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Verdasco, M. Menéndez, R. F. Delmdahl, D. H. Parker, P. Samartzis, D. J. Smith, T. N. Kitsopoulos

Título: Fotodisociación del CH₃SCH₃ en la primera banda de absorción

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: XVII Reunión Nacional de Espectroscopía

Publicación:

Lugar celebración: León, España

Fecha: 24-29 Septiembre 2000

59.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, V. J. Herrero, B. Martínez-Haya, M. Menéndez, P. Quintana, I. Tanarro, J. E. Verdasco

Título: Estudio por fotoionización resonante (REMPI) de la relajación rotacional del N₂ por colisiones con gases nobles a baja temperatura

Tipo de participación: Poster

Congreso: XVII Reunión Nacional de Espectroscopía

Publicación:

Lugar celebración: León, España

Fecha: 24-29 Septiembre 2000

* 60.

Autores: **F. J. Aoiz**

Título: Photodissociation of DMS in the A-band

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: IMAGINE 4th TMR Network Meeting

Publicación:

Lugar celebración: Fodele (Creta), Grecia

Fecha: 21-25 Octubre 2000

61.

Autores: M. Alagia, N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia, E. H. van Kleef, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Menéndez, W. Bian and H.-J. Werner

Título: Dynamics of the $\text{Cl}+\text{H}_2/\text{D}_2$ reaction: A comparison of crossed molecular beam experiments with quasiclassical trajectory and quantum mechanical calculations on a new ab initio potential energy surface

Tipo de participación: Poster

Congreso: MOLEC 2000. European Conference on Dynamics of Molecular Collisions

Publicación:

Lugar celebración: Jerusalem, Israel

Fecha: 17-22 Septiembre 2000

62.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, B. Martínez-Haya, M. Brouard, W. Denzer, C. Vallance, P. Honvault, J. M. Launay, V. J. Herrero

Título: A quasi-classical trajectory and quantum mechanical study of the stereodynamics of the $\text{O}(^1\text{D})+\text{H}_2,\text{HD}$ reactions on new ab initio potential energy surfaces. Theoretical predictions and comparison with experimental results

Tipo de participación: Poster

Congreso: Stereodynamics of chemical reactions

Publicación:

Lugar celebración: El Escorial, España

Fecha: 1-5 Diciembre 2000

63.

Autores: M. Alagia, N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia, E. H. van Kleef, G. G. Volpi, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Menéndez, W. Bian and H.-J. Werner

Título: Dynamics of the $\text{Cl}+\text{H}_2/\text{D}_2$ reaction: A comparison of crossed molecular beam experiments with quasiclassical trajectory and quantum mechanical calculations on a new ab initio potential energy surface

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: Stereodynamics of chemical reactions

Publicación:

Lugar celebración: El Escorial, España

Fecha: 1-5 Diciembre 2000

64.

Autores: F. J. Aoiz, M.T. Martínez and V. Sáez Rábanos.

Título: Quasi-classical treatment of the Stereodynamics of chemical reactions :k-r-k' vector correlations for the $\text{Li}+\text{HF}(v=1, j=1)\rightarrow\text{LiF}+\text{H}$ reaction. Tipo de participación: Poster

Congreso: Stereodynamics of chemical reactions

Publicación:

Lugar celebración: El Escorial, España

Fecha: 1-5 Diciembre 2000

* 65.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo

Título: Classical and quantum dynamical study of the dynamics of elementary reactions.

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: 2001 Pasadena Workshop on Quantum Reaction Dynamics

Publicación:

Lugar celebración: Pasadena, EE.UU

Fecha: 10-13 Enero 2001

66.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, M. Menéndez, N. Balucani, L. Cartechini, P. Casavecchia, G. G. Volpi, D. Skouteris, W. Bian and H.-J. Werner

Título: The $\text{Cl}+\text{H}_2/\text{D}_2$ reaction dynamics: a combined theoretical and experimental study

Tipo de participación: Poster

Congreso: 2001 Pasadena Workshop on Quantum Reaction Dynamics

Publicación:

Lugar celebración: Pasadena, EE.UU

Fecha: 10-13 Enero 2001

67.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, D. Sokolovski
Título: The H+D₂ quantum reaction dynamics in the collision energy range 0.5-2.2 eV. A search for dynamical resonances
Tipo de participación: Poster
Congreso: 2001 Pasadena Workshop on Quantum Reaction Dynamics
Publicación:
Lugar celebración: Pasadena, EE.UU Fecha: 10-13 Enero 2001

68.

Autores: J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría
Título: Quasi-classical trajectory study of the H+H₂O and H+D₂O reactions
Tipo de participación: Poster
Congreso: 2001 Pasadena Workshop on Quantum Reaction Dynamics
Publicación:
Lugar celebración: Pasadena, EE.UU Fecha: 10-13 Enero 2001

* 69.

Autores: **F. J. Aoiz**
Título: A reaction with several paths: Dynamics and stereodynamics of the O(¹D)+H₂ reaction.
Tipo de participación: Conferencia invitada
Congreso: Gordon Research Conference on Molecular Energy Transfer
Publicación:
Lugar celebración: Ventura, E.E.U.U. Fecha: 14-19 Enero 2001

70.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, B. Martínez-Haya, P. Quintana, E. Verdasco
Título: The photodissociation of CH₃SCH₃ and CD₃SCD₃ in the first absorption band studied by velocity map ion imaging and REMPI
Tipo de participación: Poster
Congreso: Gordon Research Conference on Molecular Energy Transfer
Publicación:
Lugar celebración: Ventura, E.E.U.U. Fecha: 14-19 Enero 2001

71.

Autores: J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría
Título: The dynamics and stereodynamics of the H+H₂O and H+D₂O reactions studied by quasi-classical trajectory calculations
Tipo de participación: Poster
Congreso: Gordon Research Conference on Molecular Energy Transfer
Publicación:
Lugar celebración: Ventura, E.E.U.U. Fecha: 14-19 Enero 2001

72.

Autores: J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría
Título: A quasi-classical trajectory study of the H+N₂O reaction
Tipo de participación: Poster
Congreso: Gordon Research Conference on Molecular Energy Transfer
Publicación:
Lugar celebración: Ventura, E.E.U.U. Fecha: 14-19 Enero 2001

73.

Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo, D. Sokolovski, F. Fernández-Alonso, B. D. Bean, R. N. Zare
Título: Observation of scattering resonances in the H+D₂ reaction: a new spectroscopy of the transition state region
Tipo de participación: Poster
Congreso: Vth Femtochemistry Conference
Publicación:
Lugar celebración: Toledo, España Fecha: 2-6 Septiembre 2001

- 74.- Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J.-M. Launay
Reaction dynamics of insertion reactions: quasiclassical trajectory and quantum mechanical study of the $O(^1D)+H_2$, $N(^2D)+H_2$ and $C(^1D)+H_2$ reactions
5th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics
Tipo de participación: *presentación oral*
Lisboa, Portugal 23-26 Marzo 2002
-
- 75.- Autores: J. Barr, I. Torres, P. Quintana, F. J. Aoiz, L. Bañares, E. Verdasco, B. Martínez-Haya
Título: Recoil energy, rovibrational population, and alignment of CD_3 fragments following the near ultraviolet photodissociation of dimethyl sulfide- d_6
5th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics
Tipo de participación: *poster*
Lisboa, Portugal 23-26 Marzo 2002
-
- 76.- Autores: J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares
Título: A quasiclassical trajectory study of the $H+H_2O$ and $H+D_2O$ reactions
5th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics
Tipo de participación: *poster*
Lisboa, Portugal 23-26 Marzo 2002
-
- *77. Autores: **F. J. Aoiz**
Título: Dynamics of elementary reactions.
Tipo de participación: Conferencia invitada
Congreso: Gordon Research Conference on Atomic and Molecular Interactions
Lugar: Bristol, Rhode Island. EE.UU 7-12 Julio 2002
-
- 78.- Autores: P. Honvault, J.-M. Launay, F. J. Aoiz, L. Bañares
Título: Quantum-mechanical and quasi-classical trajectory studies of the insertion reaction $S(^1D)+H_2 \rightarrow SH+H$
Congreso: MOLEC 2002. European Conference on Dynamics of Molecular Collisions
Tipo de participación: *poster*
Lugar: Estambul, Turquía. 1-5 Septiembre 2002
-
- 79.- Autores: G. Capozza, N. Balucani, E. Segoloni, R. Bobbenkamp, A. Russo, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J.-M. Launay
Título: Crossed beam experiments versus quantum and quasiclassical trajectory scattering calculations on an *ab initio* potential energy surface for the prototype insertion reaction $C(^1D)+H_2(D_2)$
Congreso: MOLEC 2002. European Conference on Dynamics of Molecular Collisions
Tipo de participación: *poster*
Lugar: Estambul, Turquía. 1-5 Septiembre 2002
-
- 80.- Autores: G. Capozza, N. Balucani, E. Segoloni, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, J.-M. Launay
Título: Quantum effects in the differential cross sections for the insertion reaction $N(^2D)+H_2$
Congreso: MOLEC 2002. European Conference on Dynamics of Molecular Collisions
Tipo de participación: *poster*
Lugar: Estambul, Turquía. 1-5 Septiembre 2002
-
- * 81.- Autores: **F. J. Aoiz**, L. Bañares, E. Verdasco, V. Sáez Rábanos, M. P. Miranda
Título: Stereodynamics of elementary reactions and inelastic processes: $H+D_2$ and $Ar+NO$
Congreso: STEREOYNAMICS 2002.
Tipo de participación: *Conferencia invitada*
Lugar: Schoorl, Holanda. 1-6 Diciembre 2002
-
- 82.- Autores: F. J. Aoiz, M. T. Martínez, V. Sáez Rábanos, J.M. Alvariño, M.L. Hernández
Título: Stereodynamics of the $O(^1D)+HCl \rightarrow ClO(OH)+H(Cl)$ reaction.
Congreso: STEREOYNAMICS 2002.
Tipo de participación: *Poster*

Lugar: Schoorl, Holanda. 1-6 Diciembre 2002

-
- 83.- G. Capozza, N. Balucani, E. Segoloni, R. Bobbenkamp, A. Russo, P. Casavecchia, F. J. Aoiz, L. Bañares, P. Honvault, B. Bussery-Honvault, J.-M. Launay
Crossed beam experiments versus quantum and quasiclassical trajectory scattering calculations on an ab initio potential energy surface for the prototype insertion reaction $C(^1D)+H_2(D_2)$
Stereodynamics of Chemical Reactions
Schoorl, Holanda. 1-6 Diciembre 2002
Clave: poster
-
- 84.- Autores: G. Capozza, N. Balucani, E. Segoloni, R. Bobbenkamp, A. Ruso, L. Cartechini, P. Casavecchia, L. Bañares, F. J. Aoiz, P. Honvault, B. Bussery-Honvault, J.-M. Launay
Título: The dynamics of prototype Insertion reactions: Crossed beam experiments versus quantum and quasiclassical calculations on ab initio potential energy surfaces for $C(^1D)+H_2$ and $N(^2D)+H_2$
Congreso: XX International Symposium on Molecular Beams
Tipo de participación: poster
Lugar: Lisboa, Portugal 8-13 junio 2003
-
- 85.- Autores: M. Alexander, F. J. Aoiz, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, J. E. Verdasco
Título: Inelastic scattering of NO by Ar. A comparison between classical trajectories and close-coupling state-resolved differential cross sections.
Congreso: XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)
Tipo de participación: poster
Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 86.- Autores: J.M. Alvaríño, F. J. Aoiz, M.L. Hernández, M. T. Martínez, M. Menéndez, V. Sáez Rábanos
Título: A detailed study of the dynamics of the $O(^1D)+HCl \rightarrow OH+Cl$, $ClO+H$ reactions.
Congreso: XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)
Tipo de participación: poster
Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 87.- Autores: G. Amaral, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, G. Pino, I. Torres
Título: The photodissociation of CD_3SOCD_3 at 220 nm: Internal and translational energy distributions of the CD_3 fragment.
Congreso: XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)
Tipo de participación: poster
Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 88.- Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, I. Torres, J. E. Verdasco
Título: Rotational alignment of the CD_3 fragment following the near UV photodissociation of CD_3SCD_3 ..
Congreso: XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)
Tipo de participación: poster
Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 89.- Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, M. Menéndez, K. A. Peterson, J. E. Verdasco
Título: A quasiclassical trajectory study of the dynamics of the $O(^1D)+HBr \rightarrow OH(OBr)+Br(H)$ reactions on an ab initio potential energy surface.
Congreso: XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)
Tipo de participación: poster
Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 90.- Autores: L. Bañares, F. J. Aoiz
Título: A quasiclassical trajectory time resolved study of the dynamics of insertion reactions.
Congreso: XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)
Tipo de participación: poster
Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 91.- Autores: J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. A. Collins
Título: Ab initio potential energy surface and quasiclassical trajectory study of the dynamics of the $H+N_2O$ reaction.
Congreso: XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)
Tipo de participación: poster
Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 92.- Autores: E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. N. D. S. Cordeiro
Título: A direct classical trajectory study of the acetone photodissociation on the triplet surface.

- Congreso: *XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)*
Tipo de participación: *poster*
Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 93.- Autores: S. A. Vázquez, Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo
Título: A direct classical trajectory study of the HCl elimination from the 193 nm photodissociation of vinyl chloride.
Congreso: *XVII International Conferenc on Molecular Energy Transfer (COMET)*
Tipo de participación: *poster*
Lugar: El Escorial, Madrid, 15-20 junio 2003
-
- 94.- F. J. Aoiz, L. Bañares
Time-resolved dynamics of insertion reactions. Quasiclassical trajectory study and comparison with quantum mechanical and experimental results
XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2003
Madrid, España. 7-11 Julio 2003
Clave: *poster*
-
- 95.- F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, I. Torres, E. Verdasco
Near UV photodissociation of CD₃SCD₃: CD₃ fragment (v,J) vector correlations
XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2003
Madrid, España. 7-11 Julio 2003
Clave: *poster*
-
- 96.- G. Amaral, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Barr, G. Pino, I. Torres
Photodissociation of CD₃SOCD₃ at 220 nm: internal and translational energy distribution of the CD₃ fragment
XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2003
Madrid, España. 7-11 Julio 2003
Clave: *poster*
-
- 97.- E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos, S. A. Vázquez, F. J. Aoiz, L. Bañares, J. Santamaría-Antonio
Quasi-classical trajectory study of H₂ elimination in the photodissociation of difluoroethylenes at 193 nm
XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2003
Madrid, España. 7-11 Julio 2003
Clave: *poster*
-
- 98.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, M. A. Collins
Ab initio potential energy surface and quasi-classical trajectory study of the dynamics of the H+N₂O reaction
XXIX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Física. 6th Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER2003
Madrid, España. 7-11 Julio 2003
Clave: *poster*
-
- *99- Autores: **F.J. Aoiz**, M. P. Miranda, L. Bañares
Título: "Stereodynamics of simple reactions: how the direction of the initial rotation does control the reactivity"
Congreso: American Chemical Society annual meeting
Tipo de participación: *Conferencia invitada*
Lugar: Anaheim, California (USA) 28 marzo- 3 abril 2004
-
- 100.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, S. Vázquez, E. Martínez-Núñez, A. Fernández-Ramos
Quasiclassical trajectory studies of the F+CH₄ reaction using an ab initio potential energy surface constructed by interpolation
27th International Symposium on Free Radicals
Taipei, Taiwan. 25-30 Julio 2004
Clave: *poster*
-
- 101.- N. Balucani, G. Capozza, E. Segoloni, L. Cartechini, R. Bobbenkamp, P. Casavecchia, L. Bañares, F. J. Aoiz, P. Honvault, B. Bussery-Honvault, J.-M. Launay
The dynamics of prototype insertion reactions: Crossed beam experiments versus quantum and quasiclassical trajectory scattering calculations on ab initio potential energy surfaces for C(¹D)+H₂ and N(²D)+H₂
27th International Symposium on Free Radicals
Taipei, Taiwan. 25-30 Julio 2004
Clave: *poster*

-
- 102.- J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares
Quasiclassical trajectory studies of the Cl+CH₄ reaction using an ab initio potential energy surface constructed by interpolation
27th International Symposium on Free Radicals
Taipei, Taiwan. 25-30 Julio 2004
Clave: *poster*
-
- *103.- Autores: **F. J. Aoiz**, L. Bañares, J. Barr, I. Torres, G. A. Pino, G. A. Amaral
Título: "Photodissociation dynamics of polyatomic molecules containing sulfur: An experimental study."
Congreso: 27th International Symposium on Free Radicals.
Tipo de participación: *Conferencia invitada*
Lugar: Taipei, Taiwan. 25-30 de Julio 2004
-
- 104.- Autores: J. Aldegunde, J.M. Alvaríño, M.P. Miranda, F. J. Aoiz
Título: "Stereodynamics of the H+D₂ reaction: how the direction of the initial rotation does control the reactivity."
Congreso: 18th International Symposium on Gas Kinetics
Tipo de participación: *Poster*
Lugar: Bristol, UK. 7-12 de Agosto 2004
-
- *105.- Autores: R. Bobbenkamp, H.J. Loesch, M. Menéndez, E. Verdasco, and F. J. Aoiz.
Título: "The dynamics of the reactive process Li+HF→LiF+H: new experimental and theoretical results".
Congreso: *STEREODYNAMICS 2002*.
Tipo de participación: *Conferencia invitada*
Lugar: Osaka, Japón. 2-6 de Diciembre 2004
-
- *106.- Autores: F. J. Aoiz, M. P. Miranda, V. Sáez Rábanos and J. Aldegunde
Título: "Effect of the polarization of the initial rotational angular momentum on the reactivity: How reactants polarization can be used to control chemical reaction."
Congreso: *CCP6 Workshop on Semiclassical and other methods for understanding Molecular Collisions and Chemical Reactions.*
Tipo de participación: *Conferencia invitada*
Lugar: Belfast, Gran Bretaña. 2-5 de Abril 2005
-
- *107.- Autores: M. P. Miranda, F. J. Aoiz, V. Sáez Rábanos, M. Brouard and J. Aldegunde
Título: "Stereodynamical portraits and the chemical shapes of bimolecular collisions. Congreso: *CCP6 Workshop on Semiclassical and other methods for understanding Molecular Collisions and Chemical Reactions.*
Tipo de participación: *Conferencia invitada*
Lugar: Belfast, Gran Bretaña. 2-5 de Abril 2005
-
- *108.- Autores: F. J. Aoiz
Título: "How the direction of the rotational angular momentum affects and controls the reactivity: Stereodynamics of simple chemical reactions"
Congreso: XXI International Symposium on Molecular Beams
Tipo de participación: *Conferencia invitada*
Lugar: Hersonissos, Creta, Grecia. 15-20 de Mayo 2005
-
- 109.- Autores: A. E. Pomerantz, F. Ausfelder, R. N. Zare, J.C. Juanes-Marcos, S. Althorpe, V. Sáez Rábanos, F.J. Aoiz, L. Bañares, J. F. Castillo.
Título: "Quantum state distributions for reactive and inelastic H+D₂ collisions."
Congreso: XXI International Symposium on Molecular Beams
Tipo de participación: *Poster*
Lugar: Hersonissos, Creta, Grecia. 15-20 de Mayo 2005
-
- 110.- Autores: Nadia Balucani, Giovanni Capozza, Enrico Segoloni, L. Cartechini, Rolf Bobbenkamp, Piergiorgio Casavecchia, Luis Bañares, F. Javier Aoiz, B. Bussery-Honvault and J. M. Launay.
Título: "Crossed beam experiments versus quantum and quasiclassical trajectory scattering calculations on *ab initio* potential energy surfaces for the C(¹D)+H₂ and N(²D)+H₂."
Congreso: XXI International Symposium on Molecular Beams
Tipo de participación: *Poster*
Lugar: Hersonissos, Creta, Grecia. 15-20 de Mayo 2005
-
- 111.- Autores: R. Bobbenkamp, M. Menéndez, E. Verdasco, F. J. Aoiz, R. Bobbenkamp and H.J. Loesch,
Título: "Experimental and theoretical study of the influence of reagent rotation on the Li+HF(v=0,j)→LiF+H reaction."
Congreso: XXI International Symposium on Molecular Beams
Tipo de participación: *Poster*

- Lugar: Hersonissos, Creta, Grecia. 15-20 de Mayo 2005
-
- *112.- Autores: F. J. Aoiz
Título: "Some examples of experimental and theoretical studies of the dynamics of photodissociation and chemical reactions."
Congreso: 34° Congreso Nazionale de la Divisione di Chimica Fissica de la Società Italiana de Chimica.
Tipo de participación: *Conferencia invitada*
Lugar: Siena, Italia. 20-24 de Junio 2005
-
- *113.- Autores: F. J. Aoiz
Título: "Quasiclassical trajectory studies of the dynamics of 4 and 6 atoms reactions using potential energy surfaces by interpolation of *ab initio* data."
Congreso: VIII Quantum Reactive Scattering
Tipo de participación: *Conferencia invitada*
Lugar: Santa Cruz, California, USA. 15-19 de Julio 2005
-
- 114.- Autores: F. J. Aoiz, L. Bañares, T. González-Lezama, V. J. Herrero, I. Tanarro.
Título: "Influence of rotation and isotope effect on the dynamics of the N(²D)+H₂ reactive system. Congreso: VIII Quantum Reactive Scattering
Tipo de participación: *Poster*
Lugar: Santa Cruz, California, USA. 15-19 de Julio 2005
-
- 115.- Autores: J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares, S. Vázquez, E. Martínez Núñez, A. Fernández-Ramos.
Título: "The F+CH₄(CD₄) reaction dynamics using an *ab initio* potential energy surface constructed by interpolation."
Tipo de participación: *Poster*
Lugar: Santa Cruz, California, USA. 15-19 de Julio 2005
-
- 116.- Autores: F. J. Aoiz
Título: "Stereodynamics of simple collision processes: Effect of the polarization of the initial angular momentum on the H+D₂(v=0, j=2) reactive and inelastic collisions."
Congreso: CCP6 Workshop on Vector correlations and alignment in Chemistry.
Tipo de participación: *Conferencia invitada*
Lugar: Bristol, U.K. 24-27 de Julio 2005
-
- *117.- Autores: F. J. Aoiz, J. F. Castillo, L. Bañares.
Título: "The dynamics of 4 and 6 atom reactions on interpolated *ab initio* potential energy surfaces".
Congreso: ESPA 2006
Tipo de participación: *Conferencia invitada*
Lugar: Santiago de Compostela, Spain 18-21 de Julio 2006
-
- 118.- Autores: J. F. Castillo, F. J. Aoiz, L. Bañares.
Título: "Quasiclassical trajectory studies of the Cl+CH₄ reaction using an *ab initio* potential energy surface constructed by interpolation".
Congreso: ESPA 2006
Tipo de participación: *Poster*
Lugar: Santiago de Compostela, Spain 18-21 de Julio 2006
-
- *119.- Autores: F. J. Aoiz.
Título: "Cumulative reaction probabilities: A comparison between Quasiclassical and Quantum mechanical results."
Congreso: XII Dalian Institute of Chemical Physics Symposium on Molecular Physics
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*
Lugar: Dalian, P. R. of China. 13-15 de Octubre 2006
-
- *120.- Autores: F. J. Aoiz, M. P. Miranda, J. Aldegunde, V. Sáez Rábanos and J. M. Alvaríño.
Título: "Stereodynamics and mechanism of elementary chemical reactions: How the direction of the rotational angular momentum affects and controls the reactivity."
Congreso: Stereodynamics 2006
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*
Lugar: Arcachon, France 10-14 de Noviembre 2006
-
- *121.- Autores: F. J. Aoiz, T. González-Lezana and V. Sáez Rábanos.
Título: "A statistical trajectory model for insertion reactions: A comparison with rigorous statistical quantum mechanical results."
Congreso: IXth Workshop on Quantum Reactive Scattering.
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*
Lugar: Clare Collage, Cambridge, United Kingdom 18-22 July 2007
-

- 122.- Autores: E. Carmona-Novillo, T. González-Lezana, O. Roncero, P. Honvaults, J. M. Launay, N. Bulut, F.J. Aoiz, L. Bañares, A. Trottier and E. Wrede.
Título: "The $H^+ + D_2(v=0, j=0)$ reaction: A comparison between theory and experiment."
Congreso: IXth Workshop on Quantum Reactive Scattering.
Tipo de participación: Poster
Lugar: Clare Collage, Cambridge, United Kingdom 18-22 July 2007
-
- 123.- Autores: N. Bulut, J. F. Castillo, F.J. Aoiz and L. Bañares.
Título: "Reaction dynamics and kinetics of the $LiH + H^+$ reaction by time-dependent real wave packet and quasiclassical trajectory calculations."
Congreso: IXth Workshop on Quantum Reactive Scattering.
Tipo de participación: Poster
Lugar: Clare Collage, Cambridge, United Kingdom 18-22 July 2007
-
- *124.- Autores: F.J. Aoiz
Título: "A combined study of the dynamics of insertion reactions."
Congreso: XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química.
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Campus de Toledo UCLM, Toledo, España, 9-14 Septiembre 2007
-
- *125.- Autores: F.J. Aoiz
Título: "Stereodynamics of inelastic and reactive processes."
Congreso: International Symposium of Stereodynamics of Chemical Reactions (Stereodynamics 2008)
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Dalian, Liaoning, P. R. China, 13-18 Octubre 2008
-
- 126.- Autores: J. Klos, M. Brouard, R. Muckle, E. Verdasco, and F.J. Aoiz
Título: Inelastic Scattering of rare gas atoms with NO(X) molecules revisited."
Congreso: XXIII International Symposium of Molecular Beams. (ISMB 2009))
Tipo de participación: *Presentación oral Invitada*.
Lugar: Dalian, Liaoning, P. R. China, 1-5 Junio 2009
-
- 127.- Autores: D. Zhang, A. Ballast, M. Brouard, F.J. Aoiz, D. Ding, and S. Stolte
Título: "Doublet and Multiplet structures in the rotational rainbows of quantum mechanically state-to-state resolved rotationally inelastic DCSSs."
Congreso: XXIII International Symposium of Molecular Beams. (ISMB 2009))
Tipo de participación: *Presentación oral Invitada*.
Lugar: Dalian, Liaoning, P. R. China, 1-5 Junio 2009
-
- *129.- Autores: F.J. Aoiz, P. G. Jambrina, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, and M. Hankel
Título: "Cumulative reaction probabilities and dynamics of the isotopic variants of the $H^+ + H_2$ reaction".
Congreso: 10th International Workshop on Quantum Reactive Scattering. (QRS 10th)
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Dalian, Liaoning, P. R. China, 6-10 Junio 2009
-
- *130.- Autores: F.J. Aoiz, P. G. Jambrina, V. J. Herrero, V. Sáez Rábanos, and J. M. Alvaríño
Título: "The dynamics of the isotopic variants of the $H^+ + H_2$ reaction: Can they be considered statistical reactions?".
Congreso: IBER 2009
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Santiago de Compostela, La Coruña, Spain, 12-15 Julio 2009
-
- *131.- Autores: F.J. Aoiz, P. G. Jambrina, V. Sáez Rábanos, and T. González-Lezana
Título: "A statistical quasiclassical trajectory model for insertion reactions: Application to the $H^+ + H_2$ reaction."
Congreso: 14th International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics (QSCP)
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: El Escorial, Madrid, Spain, 13-19 September 2009
-
- *132.- Autores: F.J. Aoiz
Título: "Quantum Mechanical and Quasiclassical Trajectory Calculations for Presumably Statistical Reactions"
Congreso: 2010 Mesilla Chemistry Workshop
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Mesilla, New Mexico, USA, 7-10 February 2010
-
- *133.- Autores: F.J. Aoiz, J. Klos, M. Brouard, C. J. Eyles, and E. Verdasco.
Título: "The dynamics of inelastic collisions of rare gas atoms with NO(X) revisited."
Congreso: XVIII European Conference on Dynamics of Molecular Systems (MOLEC 2010)
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.

Lugar: Curia-Anadia, Portugal, 5-11 September 2010

- *134.- Autores: F.J. Aoiz, J. Aldegunde, L. González-Sánchez, P. G. Jambrina, and J. F. Castillo,
Título: "Dynamics of Cl+H₂ inelastic collisions: Rainbow effects."
Congreso: XI Workshop on Quantum Reactive Scattering (QRS 2011)
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Santa Fe, New Mexico, USA, 17-21 July 2011
-
- *135.- Autores: F.J. Aoiz, J. F. Castillo, M. Menéndez, and B. Martínez-Haya
Título: "The dynamics of the Cl+O₃ reaction: A theoretical study and comparison with experimental results."
Congreso: 2011 Conference on Molecular Energy Transfer (COMET 2011)
Tipo de participación: *Contributed Talk*.
Lugar: Oxford, UK, 11-16 September 2011
-
- 136.- Autores: B. Hornung, H. Chadwick, C. J. Eyles, B. Nichols, P. G. Jambrina, F.J. Aoiz, S. Stolte and M. Brouard.
Título: "Alignment effects in the rotationally inelastic collisions of NO(X)+Ar: A joint theoretical and experimental study."
Congreso: 2011 Conference on Molecular Energy Transfer (COMET 2011)
Tipo de participación: *Poster*.
Lugar: Oxford, UK, 11-16 September 2011
- 137.- Autores: P. G. Jambrina, R. Pérez de Tudela, E. García, V. J. Herrero, V. Sáez-Rábanos, and F.J. Aoiz,
Título: "Dynamics of the reaction of muonium atoms with hydrogen molecules: Zero point energy, tunnelling and vibrational adiabaticity."
Congreso: European Conference on the Dynamics of Molecular systems. MOLEC 2012.
Tipo de participación: *Poster*.
Lugar: Oxford, UK, 10-13 September 2012
- 138.- Autores: F.J. Aoiz, D. Herráez-Aguilar, P. G. Jambrina, J. F. Castillo, O. Roncero and V. J. Herrero.
Título: "Dynamics of Elementary reactions of astrophysical interest."
Congreso: II National Conference on laboratory and Molecular Astrophysics."
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Sevilla, 14-16 November 2012
- 139.- Autores: R. Pérez de Tudela, F. J. Aoiz
Título: "Chemical reaction rate coefficients from Ring Polymer Molecular Dynamics."
Congreso: II National Conference on laboratory and Molecular Astrophysics."
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Sevilla, 14-16 November 2012.
- 140.- Autores: F. J. Aoiz
Título: "Dynamics of the reactions of muonium with hydrogen molecules: Zero Point Energy, Tunneling and Vibrational adiabaticity."
Congreso: 2013 Mesilla Chemistry Workshop. Role of Non-Statistical Effects.
Lugar: Mesilla, Las Cruces, New Mexico (USA) February 10-13 2013
- 141.- Autores: F. J. Aoiz, J. Aldegunde, P. G. Jambrina, V. J. Herrero, V. Sáez-Rábanos, E. García
Título: "Dynamics of reaction of Mu with hydrogen molecules: zero point energy and tunneling."
Congreso: Quantum Reactive Scattering."
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Bordeaux (Francia), 10-14 June 2013
- 142.- Autores: F. J. Aoiz
Título: "A theoretical study of reactions of muonium with hydrogen molecules: Dynamics of the reactions of muonium with hydrogen molecules: Zero Point Energy, Tunneling and Vibrational adiabaticity".
Congreso: CECAM: Workshop on Many-dimensional quantum dynamics with (non) classical trajectories
Tipo de participación: *Conferencia Invitada*.
Lugar: Lausanne, 17-21 June 2013

Seminarios impartidos y conferencias invitadas

- 1.- Lugar: Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales, Madrid
Título: Estudio de reacciones químicas por haces moleculares
Fecha: 12 de Marzo de 1980
- 2.- Lugar: 4º Escuela de Verano de Electrónica Cuántica. Sunny Beach, Bourgas, Bulgaria
Título: Lasers in molecular beam experiments
Fecha: 4 de Octubre de 1986
- 3.- Lugar: IV Encuentro de Dinámica Molecular. Facultad de Química, Universidad de Salamanca, Salamanca
Título: La dinámica de la reacción $F+H_2(D_2,HD)$. Cálculos en superficies de potencial recientes
Fecha: 22 de Marzo de 1993
- 4.- Lugar: Sonder Seminar. Max Planck Institut für Strömungsforschung. Göttingen. Alemania
Título: The $F+H_2(D_2,HD)$ reaction revisited
Fecha: 26 de Septiembre de 1994
- 5.- Lugar: Institut für Theoretische Chemie. Universität Stuttgart, Alemania
Título: Quasi-classical trajectory calculations for chemical reactions. Comparison between theory and experiment
Fecha: 5 de Octubre de 1994
- 6.- Lugar: Physical and Theoretical Chemistry Laboratory. Oxford University. Oxford, Reino Unido
Título: The hydrogen exchange reaction: a classical perspective
Fecha: 1 de Mayo de 1995
- 7.- Lugar: Cursos de Verano de la Universidad Complutense. El Escorial
Título: The ozone molecule: structure, spectroscopy.
Fecha: 8 de Julio de 1996
- 8.- Lugar: Cursos de Verano de la Universidad Complutense. El Escorial
Título: Photochemistry of ozone: photodissociation dynamics
Fecha: 9 de Julio de 1996
- 9.- Lugar: Workshop on Comparisons of Classical and Quantum Dynamics. Mesilla. EEUU
Título: Classical versus quantum mechanical calculations of the dynamics of elementary reactions
Fecha: 12 de Febrero de 1997
- 10.- Lugar: Oxford. Reino Unido, J.P. Simons. A celebratory meeting on dynamics and spectroscopy.
Título: Classical and quantal stereodynamics of elementary reactions
Fecha: 14 de Septiembre de 1999
- 11.- Lugar: Salamanca. Curso interuniversitario de Doctorado de Química Teórica y Computacional
Título: Dinámica de las Reacciones Químicas (Curso 2001/02)
Fecha: 18-22 de Febrero de 2002
- 12.- Lugar: El Escorial. Madrid. Curso interuniversitario de Doctorado de Química Teórica y Computacional
Título: Dinámica de las Reacciones Químicas (Curso 2002/03)
Fecha: 17-22 de Febrero de 2003
- 13.- Lugar: Universidad de Valladolid. Lección magistral.
Título: Andando con moléculas: Espectroscopia Láser aplicada al estudio de la Dinámica de Reacciones Químicas.
Fecha: 14 de Marzo de 2003
- 14.- Lugar: Madrid. III Semana de la Ciencia, organizada por la Comunidad de Madrid. Conferencias divulgativas sobre Química Teórica y Computacional. Título: Andando con moléculas: Cómo se producen las reacciones químicas.

- Fecha: 4 de noviembre de 2003.
- 15.- Lugar: Valladolid. Curso de Doctorado 'Estudios Avanzados en Química' de la Universidad de Valladolid. Profesor invitado. Impartición de 1,5 créditos.
- 16.- Lugar: Florencia, European Laboratory for non-linear Spectroscopy (LENS)
Curso intensivo de doctorado. "Walking with molecules. Laser spectroscopy applied to Reaction Dynamics".
Impartición de 10 créditos. 24-30 de Junio 2005.
- 17.- Lugar: Leeds. School of Chemistry, University of Leeds.
"Stereodynamics of elementary reactions: Control and mechanism."
7 Diciembre 2005.
- 18.- Lugar: Oxford. Department of Chemistry. Physical and Theoretical Chemistry Lab.
PTCL Departmental Seminars. Hilary Term 2006
Stereodynamics and chemical reactions: Angular Momentum polarisation and reaction mechanism.
27 de Febrero 2006.
- 19.- Lugar: Cambridge. Department of Chemistry.
Theoretical Chemistry Colloquia. Lent Term 2006
Stereodynamics of Elementary Reactions: Angular Momentum polarisation and reaction mechanisms.
7 de Marzo 2006.
- 20.- Lugar: Berlín. Fritz-Haber Institut of Max Planck Gesellschaft.
Sonder Seminar.
"How the direction of the rotational angular momentum affects and controls the reactivity: Stereodynamics and mechanism of elementary chemical reactions"
15 de Septiembre 2006.
- 21.- Lugar: Santander. Universidad de Cantabria. Curso interuniversitario de Doctorado de Química Teórica y Computacional
Título: Dinámica de las Reacciones Químicas (Curso 2006/07)
Fecha: 17-22 de Febrero de 2007
- 22.- Lugar: Sevilla, Universidad Pablo Olavide.
Ciclo de conferencias Quimiláser.
"Dinámica y Estereodinámica reactiva de alta resolución con láseres"
2 de Febrero 2008.
- 23.- Lugar: Madrid. Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales.
"Estereodinámica: ¿Puede controlarse una reacción química variando la polarización de los reactivos?"
14 de marzo de 2012.

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Tesis Doctorales dirigidas

Título: Estudio de procesos fotoiniciados mediante espectroscopia de ionización multifotónica resonante (REMPI)

Calificación: Sobresaliente cum laude

Doctorando: **Pablo Quintana Romojaro**

Universidad: Complutense de Madrid

Facultad de Química

Fecha: 8 de Noviembre 2002

Director: F. J. Aoiz y E. Verdasco.

Título: Stereodynamics of Chemical Reactions

Doctorado Europeo. Calificación: Sobresaliente cum laude y Premio Extraordinario de Doctorado.

Doctorando: **Jesús Aldegunde Carrión**

Universidad: Salamanca

Facultad de: Química

Fecha: 23 de Mayo de 2007

Directores: F. J. Aoiz y J. M. Alvaríño.

Título: Dynamics and Stereodynamics of barrierless reactions: Statistical and dynamical effects.

(Dinámica y estereodinámica de reacciones sin barrera: Efectos estadísticos y dinámicos.)

Doctorado Europeo. Calificación: Sobresaliente cum laude y Premio Extraordinario de Doctorado.

Doctorando: **Pablo García Jambrina**

Universidad: Salamanca

Facultad / Escuela: Química

Fecha: 7 de Septiembre 2011

Directores: F. J. Aoiz y J. M. Alvaríño.

Investigadores Pre y Postdoctorales tutelados

Bruno Martínez-Haya. Becario postdoctoral de reincorporación y becario Caja Madrid. De 1997 a 2000.

Jesús Fernández Castillo. Investigador Ramón y Cajal. Desde Enero de 2001 a Noviembre 2006.

Inmaculada Torres. Investigadora Ramón y Cajal. Desde octubre 2000 a Febrero 2005.

Gustavo Ariel Pino. Investigador postdoctoral becario del Mrio. de Educación y Ciencia en el programa Doctores y Tecnólogos Extranjeros. De Octubre de 2001 a Enero 2004.

Gabriel Amaral Mathon. Investigador postdoctoral becario del Mrio. de Educación y Ciencia en el programa Doctores y Tecnólogos Extranjeros de Noviembre 2002 a Abril 2004. Investigador Juan de la Cierva de Enero 2005 al presente.

Jonathan Barr. Marie Curie postdoctoral fellowship. EU Research Training Network. HPRN-CT-1999-00007. De Octubre 2000 a Febrero 2004.

Jacek Klos. Marie Curie postdoctoral fellowship. EU Research Training Network. HPRN-CT-1999-00007. De Octubre 2003 a Febrero 2004.

Chris Eyles. Oxford University. Septiembre 2005 a Julio 2006. Part II thesis.

Jesús Aldegunde Carrión. Universidad de Salamanca. 2004-2007. Becario predoctoral.

Pablo García Jambrina. Universidad de Salamanca. 2006—2010. Becario predoctoral.

Diego Herráez Aguilar. Universidad Complutense 2010-. Becario predoctoral.

Ricardo Pérez de Tudela. Universidad complutense. Contratado postdoctoral. 2011-2013

Participación en comités y representaciones internacionales

Título del Comité: International Advisory Board

Entidad de la que depende: Revista Physical Chemistry Chemical Physics

Tema: Química Física

Fecha: Desde enero de 1999

Título del Comité: Scientific Committee IBER 2002

Entidad de la que depende: GEFAM, RSEQ

Tema: Física Molecular y dinámica de reacciones

Fecha: Desde enero de 2002

Título del Comité: International Advisory Committee of the Conference on Molecular Energy Transfer (COMET)

Entidad de la que depende:

Tema: Transferencia de energía, Dinámica molecular de reacciones químicas

Fecha: Desde julio de 1999

Título del Comité: International Advisory Committee of the Internacional Symposium of Molecular Beams.

Entidad de la que depende:

Tema: Haces moleculares, Reactividad Química, Transferencia de energía, Dinámica molecular de reacciones químicas

Fecha: Desde Mayo 2005

Título del Comité: International Editorial Board of the Journal of Chemical Physics.

Entidad de la que depende: American Institute of Physics.

Tema: Química Física

Fecha: Desde enero de 2010

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Experiencia en organización de actividades de I+D

Organización de congresos, seminarios, jornadas, etc., científicos-tecnológicos

Título: XVIII Conference on Molecular Energy Transfer

Tipo de actividad: Chairman Organizing Committee

Ambito: Internacional

Fecha: 15-20 de Junio 2003

Título: Workshop on Quantum Reactive Scattering

Tipo de actividad: Chairman Organizing Committee

Ambito: Internacional

Fecha: 20-23 Junio 2003

Título: Curso Interuniversitario de Doctorado de Química Teórica y Computacional

Tipo de actividad: Coordinador del Curso

Ambito: Nacional

Fecha: 27 de Enero a 22 de Febrero 2003

Título: Curso de Verano UCM: Lasers in the XXI century.

Tipo de actividad: Organizador y director del curso

Fecha: 30-6-08 al 4-7-08

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Experiencia de gestión de I+D

Gestión de programas, planes y acciones de I+D

Título: Proyecto de Acondicionamiento de los semisótanos del martillo sur del Pabellón A de la Facultad de Química para la ubicación de los CAIs de la UCM

Tipo de actividad: Gestión del proyecto y consecución de la obra
Fecha: 2002/2003

Título: Proyecto de Acondicionamiento y reubicación del Centro de determinación estructural molecular de la UCM

Tipo de actividad: Elaboración y gestión del proyecto y consecución de la obra
Fecha: 2002/2004

Título: Director del Centro de Asistencia a la Investigación de Espectroscopia Multifotónica.

Tipo de actividad: Gestión
Fecha: De 1992 al 31/12/2013

Supervisor de contrato Ramón y Cajal de:

Inmaculada Torres Novalbo (desde Octubre 2001)
Jesús Fernández Castillo (desde Octubre de 2001)

Supervisor de contrato Juan de la Cierva de.

Gabriel Amaral Mathon (desde enero de 2005)

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Otros méritos o aclaraciones que se desee hacer constar
(utilice únicamente el espacio equivalente a una página).

PREMIOS

- 1.- Premio Extraordinario de Licenciatura. Curso 1975/1976. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense de Madrid.
- 2.- Accésit al Premio Nacional de Fin de Carrera. Curso 1975/1976. Ministerio de Educación y Ciencia.
- 3.- Premio Extraordinario de Doctorado. Curso 1980/1981. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense de Madrid.
- 4.- Premio de Investigación 2006 de la Real Sociedad Española de Química en el área de Química Física.

BECAS

- 1.- Beca Predoctoral. Plan Nacional de Formación de Personal Investigador. Ministerio de Educación y Ciencia
Periodo: 1977-1980 (4 años)
- 2.- Beca Postdoctoral. Plan Nacional de Formación de Personal Investigador. Ministerio de Educación y Ciencia
Periodo: 1981 (9 meses)
- 3.- Beca Postdoctoral MEC/Fulbright. Ministerio de Educación y Ciencia y Comisión Fulbright
Periodo: 1981-1982 (15 meses)
- 4.- Beca Fundación del Amo. Universidad Complutense de Madrid
Periodo: Mayo-Octubre 1990
- 5.- Beca del "Programa de Estancias de Investigadores Españoles en Centros de Investigación Extranjeros".
Ministerio de Educación y Ciencia
Periodo: Mayo-Octubre 1995
- 6.- Beca Sabáticos Complutense para su disfrute en la Universidad de Oxford. Período: Octubre 2005-Enero 2006.

VISITAS A CENTROS EXTRANJEROS

- 1.- Lugar: Centro de Física Molecular. Universidad de Lisboa. Portugal.
Fecha: 1984 (1 mes).
Tema: Interacciones atómicas y moleculares. Haces moleculares.
- 2.- Lugar: Department of Chemistry. University of Nottingham. Reino Unido.
Fecha: 1989 (1,5 meses)
Tema: Estudio con haces moleculares de las reacciones quimiluminiscentes de Ar* con compuestos fluorocarbonados.
- 3.- Lugar: Department of Chemistry. University of Nottingham. Reino Unido.
Fecha: 1992 (2 meses)
Tema: Estudio de correlaciones vectoriales en procesos de predicción por alienamiento de velocidad con láseres.

COMPLEMENTOS POR MÉRITOS DOCENTES (QUINQUENIOS)

- | | | |
|-----|------------------------------|-----------|
| 1.- | Periodo: 1/10/1976-30/9/1981 | concedido |
| 2.- | Periodo: 1/10/1981-30/9/1986 | concedido |
| 3.- | Periodo: 1/10/1986-30/9/1991 | concedido |
| 4.- | Periodo: 1/10/1991-30/9/1996 | concedido |
| 5.- | Periodo: 1/10/1996-30/9/2001 | concedido |
| 6.- | Periodo: 1/10/2001-30/9/2006 | concedido |

TRAMOS DE INVESTIGACIÓN (SEXENIOS)

- | | | |
|-----|--------------------|----------------------|
| 1.- | Periodo: 1977-1982 | concedido 23/11/1990 |
| 2.- | Periodo: 1983-1988 | concedido 23/11/1990 |
| 3.- | Periodo: 1989-1994 | concedido 25/10/1995 |
| 4.- | Periodo: 1995-2000 | concedido 11/07/2001 |
| 5.- | Periodo: 2000-2006 | concedido 5/05/2007 |
| 6.- | Periodo 2007-2012 | concedido 23/04/2013 |

OTROS MERITOS

- Miembro del *International Advisory Board* de la revista *Physical Chemistry Chemical Physics*
- Miembro del *International Editorial Board* de la revista *Journal of Chemical Physics*
- Referee habitual de *J. Chem. Phys.*, *J. Phys. Chem.*, *Chem. Phys. Lett.*, etc.

CITAS DE ARTÍCULOS CIENTÍFICOS SIGNIFICATIVOS PUBLICADOS ENTRE 1991-2010 (ACTUALIZADO A Noviembre de 2013)

h index=41

Average Citations per Item: 23.68

1991

J. Chem. Phys. **94** 7991-8007 (1991) 58

1992

Journal Chem. Physics, 97, 7423-7436, (1992) 131

1993

29. J. Chem. Soc. Faraday Trans., **89**, 1427 (1993) 81

1994

33. Chem. Phys. Lett., **218**, 422-432 (1994) 42

34. Chem. Phys. Lett., **223**, 215 (1994) 94

36. J. Chem. Phys., **101**, 5781 (1994) 53

37. J. Phys. Chem., **98**, 10665 (1994) 51

1995

38. J. Chem. Phys., **102**, 9248 (1995) 79

39. Science, **269**, 207 (1995) 126

1996

J. Phys. Chem. **100**, 4071-4083(1996) 35

46. J. Chem. Phys. **105**, 4964-4982 (1996) 180

49. Science, **273**, 1519 (1996) 89

Chem. Phys. Lett. **262** 589-597 (1996) 42

Chem. Phys. Lett. **256** 561-568 (1996) 40

1997

Chemical Physics Letters **264** (5): 487-494 (1997) 29

Chemical Physics Letters **265**, 129-136 (1997) 34

J. Chem. Phys. **106**: 7862-7864 (1997) 36

J. Phys. Chem. A, **101**, 6403-6414 (1997) 64

J. Phys. Chem. A, **101**, 7544-7557 (1997) 58

Faraday Discuss. Chem. Soc., **108**, 375 (1997) 61

1998

J. Chem. Phys. **108**, 6160-6169 (1998) 37

J. Chem. Soc. Faraday Trans., **94**, 2483 (1998) 137

J. Chem. Phys., **109**, 7244 (1998) 77

1999

Physical Chemistry Chemical Physics **1**, 1149-1158 (1999) 31

J. Chem. Phys. **110**, 9971-9981 (1999) 50

J. Chem. Phys. **111**, 5368-5383 (1999) 75

J. Chem. Phys. **111**, 4013-4024 (1999) 69

2000

Journal of Chemical Physics **112**, 670-685 (2000) 49

Physical Chemistry Chemical Physics 2 , 599-612 (2000)	31
Chemical Physics Letters 328 (4-6): 500-508 (2000)	19
Angewandte Chemie-International edition 39 (15), 2748-2752 (2000)	56
Physical Chemistry Chemical Physics 2 , 541-548 (2000)	22
2001	
Journal of Chemical Physics 114 (24): 10662-10672 (2001)	34
Phys. Rev. Lett. 86 (9): 1729-1732 (2001)	76
Journal of Chemical Physics 115 (5): 2074-2081 (2001)	22
2002	
Journal of Chemical Physics 116 (24): 10692-10703 (2002)	57
Physical Review Letter 89 (1) 013201 (2002)	77
2003	
J. Chem. Phys. 118 565-568 (2003)	145
2004	
J. Phys. Chem. A 108 , 1616 (2004)	59
J. ChemPhys. 120 , 3244 (2004)	42
2005	
Int. Rev. Phys. Chem. 24 , 119-190 (2005)	62
J. Phys. Chem. 109 , 6200-6217 (2005)	40
2006	
Journal of Physical Chemistry A 110 12546 (2006)	47
Journal of Physical Chemistry A 110 817-829 (2006)	67
2011	
Nature Chemistry 3 , 597-602 (2011)	24
2012	
Science 336 , 1687-1690 (2012)	14
J. Phys. Chem. Lett. 3 , 493-497 (2012)	18



**Comisión Interministerial de Ciencia y
Tecnología**

Curriculum vitae

Nombre: VALENTÍN GARCÍA BAONZA

Fecha: Marzo de 2014

Apellidos: GARCÍA BAONZA
DNI:

Fecha de nacimiento :

Nombre: VALENTÍN
Sexo: MASCULINO

Situación profesional actual

Organismo: UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
Facultad, Escuela o Instituto: CIENCIAS QUÍMICAS
Depto./Secc./Unidad estr.: QUÍMICA FÍSICA I
Dirección postal: CIUDAD UNIVERSITARIA S/N, 28040-MADRID

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 91 394 4262
Fax: 91 394 4135
Correo electrónico: vgbaonza@quim.ucm.es

Especialización (Códigos UNESCO): 2210, 2307
Categoría profesional: CATEDRÁTICO DE UNIVERSIDAD Fecha de inicio: 14/11/2008

Situación administrativa

Plantilla Contratado Interino Becario
 Otras situaciones especificar:

Dedicación A tiempo completo
A tiempo parcial

Líneas de investigación

Breve descripción, por medio de palabras claves, de la especialización y líneas de investigación actuales.

ELECTROQUÍMICA, ALTA PRESIÓN, TERMODINÁMICA, CIENCIA DE MATERIALES, ESTADO SÓLIDO

Formación Académica

Titulación Superior	Centro	Fecha
LICENCIADO EN CC. QUÍMICAS	UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID	JUNIO 1988

Doctorado	Centro	Fecha
DOCTOR EN CC. QUÍMICAS	UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID	ABRIL 1992

Actividades anteriores de carácter científico profesional

Puesto	Institución	Fechas
Profesor Titular de Universidad	Universidad Complutense de Madrid	24/07/98 – 13/11/08
Profesor Asociado tipo 2	Universidad Complutense de Madrid	24/11/97 – 23/07/98
Contratado Postdoctoral	Lawrence Livermore National Laboratory, EE. UU.	20/11/95 – 05/02/97
Ayudante de Facultad (1 ^{er} y 2 ^o periodos)	Universidad Complutense de Madrid	24/11/92 – 23/11/97
Ayudante de Primer Ciclo de Facultad	Universidad Complutense de Madrid	27/10/92 – 23/11/92

Idiomas (R = regular, B = bien, C = correctamente)

Idioma	Habla	Lee	Escribe
INGLÉS	C	C	C

**Participación en Proyectos de I+D financiados en Convocatorias públicas
(5 últimos años)**

Investigador/es Principal	Título	Entidad	Referencia	Duración	Cuantía
Valentín García Baonza (Coordinador) Coordinado con J. M. Recio (Universidad de Oviedo)	Estudio in situ de la Reactividad de Sólidos Moleculares a Altas Presiones y su Aplicación en Nuevas Estrategias de Síntesis en Ciencia de Materiales	MEC	MAT2006-13548-C02-01	01/10/06 30/09/09	133.100
Valentín García Baonza	<i>Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación de la CAM</i>	UCM/Comunidad de Madrid (CAM)	CAM-910481	01/01/07 31/12/07	11.350
Valentín García Baonza (Coordinador)	Materia a Alta Presión (MALTA) CONSOLIDER - INGENIO 2010	MEC	CSD2007-00045	2007 2014	5.166.000
Valentín García Baonza	<i>Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación de la CAM</i>	UCM/Comunidad de Madrid (CAM)	CCG07-UCM/MAT-2403	01/01/08 31/12/08	6.909
Valentín García Baonza	<i>Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación de la CAM</i>	UCM/BSCH	CCG07-UCM/MAT-2403	01/01/09 31/12/10	12.490
Valentín García Baonza (Coordinador)	Química a Alta Presión (QUIMAPRES)	CAM	S2009/PPQ-1551	01/10/10 31/12/13	847.550
Valentín García Baonza (Coordinador)	Técnico de Valorización Tecnológica	FECYT	CTV-09-643	01/01/10 31/12/11	104.320
Valentín García Baonza (Coordinador) Coordinado con J. M. Recio (Universidad de Oviedo)	Compresibilidad de Materiales	MICINN	CTQ2009-14596-C02-01	01/01/10 31/12/12	180.290
Valentín García Baonza (IP) Coordinado con J. M. Recio (Universidad de Oviedo)	Estructura y Enlace de Sólidos en Condiciones Extremas de Estrés y Temperatura	MINECO	CTQ2012-38599-C02-02	01/01/13 31/12/15	150.040

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Publicaciones o Documentos Científico-Técnicos (5 últimos años)

Artículos (Revistas ISI)

Título Autor/es	Publicación	Vol	Pág.	Año
Automerization in tetramethyl-cyclobutadiene	C. Mediavilla, J. Tortajada V. G. Baonza	<i>Chem. Phys. Lett.</i>	454 387 390	2008
Raman Spectra of Double-wall carbon nanotubes under extreme uniaxial stress	E. del Corro, J. González M. Taravillo, E. Flahaut V. G. Baonza	<i>Nano Lett.</i>	8 2215 2218	2008
Pressure-induced magnetic switching and linkage isomerism in $K_{0.4}Fe_4[Cr(CN)_6]_{2.8} \cdot 16H_2O$: X-ray absorption and magnetic circular dichroism studies	E. Coronado, M. C. Giménez, T. Korzeniak, G. Levchenko, F. Romero, A. Segura, V. G. Baonza, J. C. Cezar, F. M. de Groot, A. Milner, M. P. Pasternak	<i>J. Am. Chem. Soc.</i>	130 15519 15532	2008
Graphite under non-hydrostatic conditions	E. del Corro, J. González M. Taravillo, W. Escoffier V. G. Baonza	<i>High. Press. Res.</i>	28 583 586	2008
Direct measurement of the liquid 4:1 Methanol-Ethanol Equation of State up to 50 kbar	S. Casado, H. E. Lorenzana, M. Cáceres, M. Taravillo, V. G. Baonza	<i>High. Press. Res.</i>	28 637 640	2008
Modeling high pressure reactivity in unsaturated systems: application to dimethyl-acetylene	C. Mediavilla, J. Tortajada V. G. Baonza	<i>J. Comput. Chem.</i>	30 415 422	2009
A modified commercial scanner as an image plate for table-top optical applications	S. Casado-Rojo, H. E. Lorenzana, M. Cáceres V. G. Baonza	<i>Rev. Sci. Instrum.</i>	80 013104	2009
Universal compressibility behaviour of ions in ionic crystals	M. Taravillo, E. del Corro J. Contreras, A. M. Pendás M. Flórez, J. M. Recio V. G. Baonza	<i>High. Press. Res.</i>	29 97 102	2009
Verdigris pigment: a mixture of compounds. Input from Raman spectroscopy	M. San Andrés, J. M. de la Roja, V. G. Baonza, N. Sancho	<i>J. Raman Spectrosc.</i>	41 1178 1186	2010
Raman characterization of carbon materials under non-hydrostatic conditions	E. del Corro, M. Taravillo J. González, V. G. Baonza	<i>Carbon</i>	49 973 979	2011
Speed of Sound in Liquid Water from 253.15 to 348.15 K and Pressures from 0.1 to 700 MPa	E. Hidalgo, M. Taravillo, V. G. Baonza, P. Sanz, B. Guignon	<i>J. Chem. Eng. Data</i>	56 4800 4807	2011
Nonlinear Strain Effects in Double-Resonance Raman Bands of Graphite, Graphene and Related Materials	E. del Corro, M. Taravillo V. G. Baonza	<i>Phys. Rev. B</i>	85 033407 -1-5	2012
Raman Modes and Grüneisen Parameters of Graphite under compressive biaxial stress	E. del Corro, A. Otero M. Taravillo, V. G. Baonza	<i>Carbon</i>	50 4600- 4606	2012
Characterization of salting-out processes during CO ₂ -clathrate formation using Raman Spectroscopy. Planetological application	V. Muñoz, L. Jiménez D. Santamaría, M. Taravillo V. G. Baonza, O. Prieto	<i>Spectroscopy Letters</i>	45 407- 412	2012
Local Pressures in Zn chalcogenide polymorphs	T. Ouahrani, J. M. Menéndez, M. Marqués, J. Contreras, V. G. Baonza, J.M. Recio	<i>EuroPhys. Lett.</i>	98 56002- p1-p6	2012
An experimental device for accurate ultrasounds measurements in liquid foods at high pressure	E. Hidalgo, M. Taravillo, V. G. Baonza, P. D. Sanz, B. Guignon	<i>IOP Conf. Series: Mat. Sci. Eng.</i>	42 012044	2012
First-principles study of structure and stability in Si-C-O-based materials	A. Morales, J. M. Menéndez, M. Marqués, D. Santamaría, V. G. Baonza, J.M. Recio	<i>Theor. Chem. Acc.</i>	132 1308	2013
Three-dimensional Raman mapping of uniaxially loaded 6H-SiC crystals	E. del Corro, J. G. Izquierdo J. González, M. Taravillo V. G. Baonza	<i>J Raman Spectrosc..</i>	44 758	2013
Stress-dependent correlations for double-resonance Raman bands in graphite with defects	E. del Corro, M. Taravillo V. G. Baonza	<i>J Raman Spectrosc..</i>	-- Acc.	2014
"Properties of Sizeable [n]CycloParaPhenylenes As Ultrashort Single-Wall Carbon Nanotubes By Raman Spectroscopy: Structural and Electron-Transfer Responses Under Pressure Stress"	M. Peña, P. Mayorga, M. Kertesz, S. Yamago, ... V. G. Baonza, J. Casado	<i>Angew. Chem. Intl. Ed.</i>	-- Acc.	2014

Libros, Capítulos de Libros y Editor (5 últimos años)

CLAVE Referencia	Autor/es Editor/es	Editorial Lugar	ISBN/ISSN /Dep. Legal	Pág. Año	
Editor	High Pressure Research (Vol. 28, Issue 4)	A. Segura V. G. Baonza F. Rodríguez B. Guamis J. M. Recio A. Muñoz	Taylor & Francis Londres	0895-7959 435 679	2008
Editor	High Pressure Research (Vol. 29, Issue 1)	A. Segura V. G. Baonza F. Rodríguez B. Guamis J. M. Recio A. Muñoz	Taylor & Francis Londres	0895-7959 1 161	2009
Capítulo	Raman spectroscopy applied to Earth Sciences and Cultural Heritage. Chapter 8: Raman Spectroscopy of gases, water and other geological fluids	V. G. Baonza F. Rull J. Dubessy	Europen Mineralogical Union U.K.	978-0-903056-31-1	2012

Otras publicaciones (Tipo.- A: artículo, P: proceeding con peer-review) (5 últimos años)

Tipo	Título	Autor/es	Publicación	Vol	Pág.	Año
A	<i>Litharge obtaining from the roasting of lead white. Chromatic Characterization of the Obtained Products</i>	J. M. de la Roja N. Sancho M. San Andrés V. G. Baonza	<i>Óptica Pura y Aplicada</i>	41	245 249	2008

Participación en contratos de I+D de especial relevancia con Empresas y/o Administraciones
(nacionales y/o internacionales)

Título del contrato/proyecto: DESARROLLO DE DISPOSITIVOS DE ALTA PRESIÓN PARA APLICACIONES INDUSTRIALES Y DE INVESTIGACIÓN

Tipo de contrato: Art. 83 - LOU

Empresa/Administración financiadora: Cryovac S.L.

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 01/12/2007 hasta: 31/12/2008

Investigador responsable: Valentín García Baonza

Número de investigadores participantes: 1

TOTAL DEL PROYECTO: 24000 euros

Estancias en Centros extranjeros
(estancias continuadas superiores a un mes)

CLAVE: D = doctorado, P = postdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras (especificar).

Centro: Lawrence Livermore National Laboratory

Localidad: Livermore, CA País EE.UU.

Fecha: 11/1995

Duración (semanas): 66

Tema:

Clave: P, C

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Contribuciones a Congresos (5 últimos años)

(P: póster, O: oral; Ámbito.- I: Internacional, N: Nacional)

Tipo	Título / Conferencia	Lugar	Ámbito	Año
P	The Habitability of the Icy Subsurface and the Potential Aqueous Ocean of Europa. Experiments at High Pressure 39 th Lunar and Planetary Science XXXIX	League City, TX (USA)	I	2008
P	Differentiation of Gas-Rich Briny Cryomagmas in Icy Satellites. Simulation Experiments at High Pressure Science of Solar System Ices Workshop	Oxnard, CA (USA)	I	2008
P	Laboratory Experiments on the Chemical Evolution and Astrobiology of Deep Aqueous Reservoirs of the Icy Satellites European Planetary Science Congress 2008	Münster (Alemania)	I	2008
P	Direct measurement of the liquid 4:1 Methanol-Ethanol Equation of State up to 50 kbar 46 th EHPRG International Conference	Valencia	I	2008
O	Graphite under non-hydrostatic conditions 46 th EHPRG International Conference	Valencia	I	2008
P	Automerization in compressed unsaturated molecular systems 46 th EHPRG International Conference	Valencia	I	2008
P	Universal compressibility behaviour of ions in ionic crystals 46 th EHPRG International Conference	Valencia	I	2008
P	Frequency and bulk modulus changes at the B1-B2 high-pressure phase transition 46 th EHPRG International Conference	Valencia	I	2008
P	The Effect of Pressure on Twisted π-Electron System Electro-Optic Chromophores 46 th EHPRG International Conference	Valencia	I	2008
P	Chemical evolution and potential habitability of deep aqueous reservoirs of the icy satellites of the solar system. High pressure experiments 46 th EHPRG International Conference	Valencia	I	2008
P	Interpretation of Raman spectra of carbon nanotubes under non-hydrostatic conditions Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50 International Conference on High Pressure Science and Technology	Tokyo (Japón)	I	2009
P	Verdigris, a pigment with different hues. Relation between chemical composition and colour 5 th International Congress on the Application of Raman Spectroscopy in Art and Archaeology (RAA2009)	Cancún (Méjico)	I	2009
P	Verdigris pigment: a mixture of compounds. Input from Raman spectroscopy 2 nd Latin-American Symposium on Physical and Chemical Methods in Archaeology, Art and Cultural Heritage Conservation (LASMAC 2009)	Bilbao	I	2009
P	Experimental and theoretical analysis of Moissanite Anvil Cells for non-hydrostatic experiments on Carbon-based materials 47 th EHPRG International Conference	París (Francia)	I	2009

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Contribuciones a Congresos (cont.)

Tipo	Título / Conferencia	Lugar	Ámbito	Año
P	Implementation of ultrasound velocity measurements at high pressure to study micellar dynamics 47 th EHPRG International Conference	París (Francia)	I	2009
P	Interpretation of Raman spectra of carbon nanotubes under non-hydrostatic conditions Joint AIRAPT-22 & HPCJ-50 International Conference on High Pressure Science and Technology	Tokyo (Japón)	I	2009
O	High-pressure melting curves of rare gas solids. Comparison between experimental data and theoretical predictions 48 th EHPRG International Conference	Uppsala (Suecia)	I	2010
P	The Role of Pressure and Non-Vertical Transitions on the Optical Spectroscopy of Tetramethylcyclobutadiene: a computational Study ESPA 2010, 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA)	Oviedo	I	2010
O	Caracterización de yunques de zafiro y moissanita a alta presión I Simposio Español de Altas Presiones	Miraflores de la Sierra	N	2011
P	A DFT study of carbide silicon oxide Satellite Meeting of the 2011 WATOC-Theoretical Modeling of Materials	Barcelona	I	2011
P	First-Principles Structural Study of Silicon Carbon Oxide Under Pressure 49 th EHPRG International Conference	Budapest	I	2011
P	Local Internal Pressures in Water-Alcohol Solutions 8 th Liquid Matter Conference	Viena	I	2011
P	Ultrasonic Evidence for Low Density Water to High Density Water Transition 8 th Liquid Matter Conference	Viena	I	2011
P	Kinetic investigations of abiotic formation of Ca and Mg carbonates: Planetological applications European Planetary Science Congress (EPSC) 2011	Nantes	I	2011
O	Melting curves regularities and spinodal boundaries ZCAM- High-Pressure Phase Transitions: Experimental Challenges and Theoretical Predictions	Zaragoza	I	2011
O	Raman spectrum as a probe for structural changes in carbon allotropes VIII Simposio de Jóvenes Investigadores RSEQ-Sigma Aldrich	Málaga	N	2011
P	Pressure dependence of Raman modes in double wall carbon nanotubes filled with amorphous selenium NanoSpain 2011, 8th Edition of NanoSpain Conference	Bilbao	I	2011
O	Compression enhanced conductivity in carbon nanotubes NanoSpain 2012, 9th Edition of NanoSpain Conference	Santander	I	2012
P	Raman Spectra of Single Walled Carbon Nanotubes between 300 and 800 K NanoSpain 2012, 9th Edition of NanoSpain Conference	Santander	I	2012
P	Study of the formation of amber-like and other fossil resins by spectroscopic methods Geo-Raman Xth Meeting G2R and SFMC	Nancy	I	2012
O	Compressive and Tensile Biaxial Strain in Graphite based materials: non-linear behavior of Double Resonance Raman Bands XVth International Conference on High Pressure in Semiconductor Physics-HPSP15	Montpellier	I	2012
P	Interlayer Friction of Graphite Sheets International Conference on Diamond and Carbon Materials	Granada	I	2012
P	Stress Distribution in a Sapphire-Moissanite anvil cell 50 th EHPRG International Conference	Thessaloniki	I	2012
O	Double Resonance Raman Bands Response to Stress in Graphite at different excitation energies 50 th EHPRG International Conference	Thessaloniki	I	2012

Contribuciones a Congresos (cont.)

Tipo	Título / Conferencia	Lugar	Ámbito	Año
O	Conformation Change of Food Lipids Processed at High Hydrostatic Pressure EFFoST Annual Meeting. European Federation of Food Science and Technology	Montpellier	I	2012
P	Raman Spectra of Single Wall Carbon Nanotubes between 300 and 800 K NanoSpain 2012, 9th Edition of NanoSpain Conference	Santander	I	2012
O	Raman Spectroscopy of Cyclic Paraphenylenes XIV ENMM 2013	Cuenca	I	2012
O	Pressure induced encapsulation of C60 in [10]Cycloparaphenylene XIV ENMM 2013	Almagro	N	2013
O	Espectroscopía Raman y Respuesta a la Presión VI Escuela de Altas Presiones	Oviedo	N	2013
O	Coordinación del catión Cu²⁺ en disolución acuosa VI Escuela de Altas Presiones	Oviedo	N	2013
O	Electronic Properties of Graphite under Pressure Extreme Conditions VI Escuela Nacional de Altas Presiones	Oviedo	N	2013
O	Ácidos Grasos Procesados a Alta Presión: Ácidos Linoleico y Elaidico VI Escuela Nacional de Altas Presiones	Oviedo	N	2013
O	From molecular diatomics to bulk solids: A pair potential approach VI Escuela Nacional de Altas Presiones	Oviedo	N	2013
O	'Response to Stress in Molecular Loops probed by Raman Spectroscopy 24th Conference Association for the Advancement of High Pressure Science and Technology	Seattle	I	2013
P	Prediction of a novel stable SiCO crystal structure 8th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2012	Barcelona	I	2013
P	Unified force-constant model for applications in condensed matter and surface science 3rd Early stage researchers workshop in nanoscience	Madrid	N	2013
P	From Molecular diatomics to bulk properties at high pressure: A pair potential approach 51 European High Pressure Research Group International Meeting	Londres	I	2013
P	Relation Between Electronic and Mechanical Properties in Graphite under Non-hydrostatic Conditions 51 European High Pressure Research Group International Meeting	Londres	I	2013
P	Raman Spectroscopic Study of the Formation of Fossil Resins Analogs 7th Internacional congreso on The Applications of Raman Spectroscopy in Art and Archaeology	Lujbiana	I	2013
P	Synthetic Polymers and Cultural Heritage. An Analytical Approach by Raman Spectroscopy 7th Internacional congreso on The Applications of Raman Spectroscopy in Art and Archaeology	Lujbiana	I	2013

Tesis Doctorales dirigidas

Título Doctor	Directores	Universidad	Fecha	Calificación	
<i>La curva espinodal: referencia adecuada</i>	Mercedes Taravillo Corralo	Valentín García Baonza	Complutense	1999	Sobresaliente

<i>para representar las propiedades termodinámicas de sólidos y líquidos</i>		Javier Núñez Delgado	de Madrid		cum laude
<i>Microscopía Raman y Análisis Vibracional a Alta Presión en Sistemas Moleculares</i>	Fco. Javier Pérez Tejedor	Valentín García Baonza Javier Núñez Delgado	Complutense de Madrid	2001	Sobresaliente cum laude
<i>Compresibilidad de Materiales a Alta Presión con Celdas de Yunque</i>	Santiago Casado Rojo	Valentín García Baonza	Complutense de Madrid	2007	Sobresaliente cum laude
<i>Aspectos energéticos, electrónicos y vibracionales en la reactividad a alta presión de derivados del acetileno</i>	César Mediavilla Martínez	José Tortajada Pérez Valentín García Baonza	Complutense de Madrid	2008	Sobresaliente cum laude
<i>Respuesta Mecánica del Grafito bajo Condiciones Extremas</i>	Elena del Corro García	Mercedes Taravillo Valentín García Baonza	Complutense de Madrid	2011	Sobresaliente cum laude
<i>Estudio espectroscópico de la formación de análogos de resinas fósiles</i>	Óscar Rodríguez Montoro	Mercedes Taravillo Valentín García Baonza	Complutense de Madrid	2013	Sobresaliente cum laude
<i>Estudio espectroscópico de la analogía Presión-solvatación en disoluciones acuosas</i>	Nubia Judith Mendoza	Mercedes Cáceres Laura J. Bonales Valentín García Baonza	Complutense de Madrid	2013	Sobresaliente
Título Doct	orando	Director/es	Universidad	Defensa	
<i>Estudio Computacional del Sistema Si-C-O: Estructura y Reactividad en Función de la Presión y Temperatura</i>	Ángel Morales García	Miriam Marqués José Manuel Recio Valentín García Baonza	Complutense de Madrid	2014	En curso
<i>Estudio Raman de Materiales Moleculares de Carbono: Efecto de P y T en Cambios Conformacionales y Reactividad Química</i>	Miriam Peña Álvarez	Mercedes Taravillo Valentín García Baonza	Complutense de Madrid	2015	En curso

Otros méritos o aclaraciones que se desee hacer constar

Actividad Investigadora (Tramos CNEAI: 4 (1989-1994 / 1995-2000 / 2001-2006 / 2007-2012))

Premios de Investigación Internacionales

1999 EHPRG Award - *European High Pressure Research Group* (EHPRG) of the *European Physical Society*

Comités Científicos y Comisiones Delegadas Internacionales

<i>EHPRG de la European Physical Society</i>	<i>Scientific Committee</i>	2002-2005, 2008-2011
<i>XXXIX EHPRG Meeting</i>	<i>Chairman - Chemistry</i>	2001
<i>Joint 20th AIRAPT-43rd EHPRG Meeting</i>	<i>Scientific Committee</i>	2005
<i>47th EHPRG Meeting</i>	<i>Advisory International Committee</i>	2009
<i>EHPRG Annual Scientific Award</i>	<i>Award Selection Committee</i>	2005, 2006
<i>XII IUCr Conference</i>	<i>Chairman - High Pressure Microsymposium</i>	2011
<i>Advanced Seminar: "Perspectives in Neutron Science In Novel & Extreme Conditions"</i>	<i>Scientific Committee</i>	2012
<i>52nd EHPRG Meeting</i>	<i>Advisory International Committee</i>	2014
<i>Joint 25th AIRAPT-53rd EHPRG Meeting</i>	<i>Organization, Chairman</i>	2015

Organización de Actividades de I+D

<i>XXXIX EHPRG Meeting</i>	<i>Organizing Committee</i>	2001
<i>II Escuela Española de Altas Presiones</i>	<i>Director</i>	2004
<i>46th EHPRG Meeting</i>	<i>Organizing Committee</i>	2008
<i>I Simposio MALTA-Consolider (Madrid)</i>	<i>Director</i>	2011
<i>II Simposio MALTA-Consolider (Barcelona)</i>	<i>Director</i>	2013

Organización de Cursos y Actividades de Divulgación Científica

<i>Semana de la Ciencia: La Presión también importa</i>	<i>Director</i>	2008-2011
<i>Curso de Verano de la UCM: Espectroscopía Raman</i>	<i>Director</i>	2011

Resumen Líneas/Perfiles de Investigación: Técnicas de Alta Presión, Ecuación de Estado y Estabilidad de Líquidos y Sólidos, Espectroscopía (Raman, IR, Luminiscencia) y Difusión de Luz Dinámica, Transiciones de Fase y Reactividad en Fase Condensada, Nanomateriales de carbono, Sistemas con Enlace de Hidrógeno, Estado Sólido: Propiedades ópticas, electrónicas y estructurales, Resistencia de Materiales y Fusión en Condiciones Extremas.

Resumen Contribuciones Científicas

Publicaciones Científicas: 84 publicaciones ISI, 8 monografías y 5 artículos especializados
Conferencias Invitadas: 30 Comunicaciones a Congresos: 80

Dirección Proyectos y Grupos de Investigación (en curso)

Director del Grupo UCM de Altas Presiones: Determinación de Parámetros Termodinámicos y Espectroscópicos
IP del Proyecto Plan Nacional de I+D+i "Estructura y Enlace de Sólidos en Condiciones Extremas de Estrés y Temperatura (CTQ2012)".
Subvención: 150.040 € (2013-2015)
Coordinador Nacional del Proyecto "Materia a Alta Presión" (CSD2007) Consolider-Ingenio 2010. Subvención: 5.166.000 € (2008-2015)
Coordinador del Proyecto "Química a Alta Presión" S2009/PPQ-1551, QUIMAPRES, Com. de Madrid. Subvención: 847.550 € (2010-2014)

Censor Revistas Internacionales

ACS Nano, Advances in Condensed Matter Physics, Carbon, Chemical Physics Letters, Computational and Theoretical Chemistry, European Journal of Mineralogy, Geochemical Transactions, High Pressure Research, Journal of Chemical Physics, Journal of Physical Chemistry (A, B C and Letters), Journal of Physics: Condensed Matter, Journal of the Physics and Chemistry of Solids, Journal of Raman Spectroscopy, Physica B, Physica Status Solidi (b), Physical Review B, Physics and Chemistry of Liquids, Spectrochimica Acta A, Zeitschrift für Naturforschung A

Evaluador y Miembro de Comisiones de Evaluación

ANEP: Comisión de Evaluación de los Programas Ramón y Cajal y Juan de la Cierva, Infraestructuras y Plan Nacional I+D+i.
MEC/MICINN/MINECO: Becas FPU, Plan Nacional de I+D+i (Panel de Expertos, Área de Química)
Agencia Andaluza del Conocimiento (AAC) – Vocal del Área de Química Física
Consejería de Educación de la Comunidad Autónoma de Madrid: Contratos Predoctorales
ANECA: Programa Academia (Ciencias)
Agencia de Calidad, Acreditación y Prospectiva de la Comunidad de Madrid (ACAP)
Experto Externo de la Comisión *Docentia* de la Universidad Rey Juan Carlos (2009, 2010, 2011, 2012, 2013)
FP6 y FP7: EX2002B064769

Miembro Organizaciones Científicas:

RSEQ (Real Sociedad Española de Química) Vocal, Representante en la RSEF y miembro del Comité Editorial de *Anales de Química*
AIRAPT (*Association Internationale pour l'Avancement de la Recherche et de la Technologie aux Hautes Pressions - International Association for the Advancement of High Pressure Science and Technology*)
EHPRG (European High Pressure Research Group) de la *European Physical Society* (EPS)
AUSE (Asociación de Usuarios de Sincrotrón Españoles)



Comisión Interministerial de Ciencia y Tecnología

Curriculum vitae

Nombre: Rosa María Llusar Barelles

Fecha: 3 de marzo de 2014

CURRÍCULUM VITAE

Apellidos: Llusar Barelles
Nombre: Rosa María **Sexo:** M
DNI: **Fecha de nacimiento:** **NRP:** 1893067035A0504
Dirección:
Ciudad: **Código Postal:** **Teléfono:**
Especialización (Código Unesco): 2210, 230307, 230326

FORMACIÓN ACADÉMICA

Licenciatura	Centro	Fecha
Ciencias Químicas	Facultad de Químicas	Junio, 1982
Grado	Facultad de Químicas (Universitat de València)	Noviembre, 1983
Doctorado	Centro	Fecha
Ciencias Químicas	Facultad de Químicas (Universitat de València)	Enero, 1987
Philosophy Doctor	Departamento de Químicas (Texas A&M University)	Agosto, 1988

Director(es) de tesis: Prof. F. Albert Cotton

Organismo: Universitat Jaume I de Castellón

Facultad, Escuela o Instituto: Esc. Sup. de Tecnología y Ciencias Experimentales

Dept./Secc./Unidad Estr.: Química Física i Analítica. Área Química-Física

Categoría profesional y fecha de inicio: Catedrática de Universidad (Septiembre, 2009)

Dirección Postal: Avda. Sos Baynat s/n, 12071 Castellón

Teléfono: 964-728086

Plantilla	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Otras Situaciones	Especificar:
Contratado	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	Dedicación: A tiempo completo	
Becario	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	Dedicación: A tiempo parcial	
Interino	<input type="checkbox"/>			

Fecha de cumplimentación: 3 de marzo de 2014

Firma:

ACTIVIDADES ANTERIORES DE CARÁCTER CIENTÍFICO O PROFESIONAL

Fechas	Puesto	Institución
1/84-8/84	Becaria F.P.I.	Universitat de València
9/84-5/86	Teaching Assistant: General Chemistry	Texas A&M University (EE. UU.)
6/86-8/87	Research Assistant: Chemistry Department	Texas A&M University (EE. UU.)
10/87- 5/88	Becaria reincorporación	Universitat de València
6/88-8/91	Técnico Superior: I + D	Proquimed (Castellón)
10/91-8/92	Postdoctoral Research Fellow: Becaria OTAN	Ames Laboratory Iowa State Univ. (EE. UU.)
2/92-12/95	Prof. Tit. Int. Esc. Univ.	Universitat Jaume I
1/96-8/09	Prof. Titular de Universidad	Universitat Jaume I
9/09-Actualidad	Catedrática de Universidad	Universitat Jaume I

IDIOMAS DE INTERÉS CIENTÍFICO

(R= Regular, B= Bien, C= Correctamente)

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Inglés	C	C	C
Francés	B	C	B

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Materiales moleculares basados en calcogenuros clúster de metales de transición. Materiales híbridos orgánicos-inorgánicos. Compuestos heterobimetálicos. Estructura molecular y electrónica. Enlace químico. Mecanismos de reacción. Conductores moleculares. Catálisis.

PARTICIPACIÓN EN PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN FINANCIADOS

TÍTULO DEL PROYECTO:	Diversificación en la producción de Caprolactama (Reg. 3577)
ENTIDAD FINANCIADORA:	Ministerio de Industria
DURACIÓN:	Enero de 1990 - Agosto de 1992
INVESTIGADOR PRINCIPAL:	Luis García Zurbano

TÍTULO DEL PROYECTO:	Nuevas alternativas en la producción de Caprolactama (Reg.3578)
ENTIDAD FINANCIADORA:	Ministerio de Industria
DURACIÓN:	Enero de 1990 - Agosto de 1992
INVESTIGADOR PRINCIPAL:	Luis García Zurbano

TÍTULO DEL PROYECTO:	Fases clústeres de haluros de los metales de transición en bajos estados de oxidación
ENTIDAD FINANCIADORA:	National Science Foundation, Solid State Chem. (EE. UU)
INVESTIGADOR PRINCIPAL :	John D. Corbett

TÍTULO DEL PROYECTO:	Materiales sólidos: Relación estructura-propiedades (B-55-CE)
ENTIDAD FINANCIADORA:	Fundació Caixa Castelló-Universitat Jaume I
ENTIDADES PARTICIPANTES:	Universitat Jaume I
DURACIÓN:	Junio de 1993 - Diciembre de 1993
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN:	2.906 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL:	Rosa Llusar
NÚMERO DE INVESTIGADORES:	4

TÍTULO DEL PROYECTO:	Relación entre materiales sólidos no moleculares y sus clústeres moleculares análogos. (PB93-0662-B)
ENTIDAD FINANCIADORA:	MEC
ENTIDADES PARTICIPANTES:	Universitat Jaume I
DURACIÓ:	Septiembre de 1994 - Septiembre de 1997
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN:	24.000 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL:	Rosa M. Llusar Barelles
NÚMERO DE INVESTIGADORES:	4 (2.4 EJC)

TÍTULO DEL PROYECTO:	Estudios teóricos de la relación estructura-propiedades en materiales sólidos inorgánicos y de la reactividad en catálisis enzimática. (BP-96-01)
ENTIDAD FINANCIADORA:	BP Oil -Universitat Jaume I
ENTIDADES PARTICIPANTES:	Universitat Jaume I
DURACIÓN:	Noviembre de 1996 - Marzo de 1998
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN:	4.040.000 pesetas
INVESTIGADOR PRINCIPAL:	Juan M. Andrés Bort
NÚMERO DE INVESTIGADORES:	7

TÍTULO DEL PROYECTO: Estudio de las interacciones de tipo "enlace de hidrógeno" en hidruros de clústeres de los metales de transición (GV-C-CN-09-071-96)
ENTIDAD FINANCIADORA: Conselleria d'Educació i Ciència (Generalitat Valenciana)
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 1997 - Diciembre de 1999
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 44.759 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Eduardo Peris Fajarnés
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 4

TÍTULO DEL PROYECTO: Diseño de materiales moleculares con propiedades ópticas no lineales, eléctricas y/o magnéticas (P1B98-07)
ENTIDAD FINANCIADORA: UJI-Fundació Caixa Castelló
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Noviembre de 1998 - Noviembre de 2001
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 26.735 euros (incluye 7.229 euros para personal)
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa M. Llusar Barelles
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 3

TÍTULO DEL PROYECTO: Síntesis y caracterización de clústeres heterobimetálicos de Mo o W con azufre y estudio de sus aplicaciones catalíticas (PB98-1044)
ENTIDAD FINANCIADORA: DGEIC
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2000 - Diciembre de 2002
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 21.084 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa M. Llusar Barelles
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 3 (1,6 EJC)

TÍTULO DEL PROYECTO: Modelación de cerámicas ferroeléctricas
ENTIDAD FINANCIADORA: AECI (Programa de cooperación científicas con Latinoamérica)
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I y Universidad de San Carlos (Brasil)
DURACIÓN: Enero de 2000 - Diciembre de 2000
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 6.000 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Juan Andrés Bort
NÚMERO DE INVESTIGADORES: -----

TÍTULO DEL PROYECTO: Uso de la Química de Coordinación para la preparación de materiales de interés tecnológico: Polímeros conductores orgánicos/inorgánicos para electrodos de baterías y dispositivos electrocromicos. Espinelas de composición y tamaño de partícula controlado para pigmentos cerámicos y nanopartículas magnéticas (1FD97-1765-C03-02 MAT)
ENTIDAD FINANCIADORA: MEC-FEDER
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universidades de Valencia, Málaga y Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2000 - Diciembre de 2001
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 33.343 euros (incluye 27.108 euros para personal)
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Eugenio Coronado Miralles(Coordinador) /Rosa M. Llusar Barelles
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 2 (UJI), 10 (total)

TÍTULO DEL PROYECTO: Theoretical studies on chemical reactivity, chemical bond and catalysis (HPMD-CT-2000-00055)
PROGRAMA INVESTIGACIÓN: Improving Human Research Potential and the Socio-Economic Knowledge base (Marie Curie)
ENTIDAD FINANCIADORA: Dirección General de Ciencia, Investigación y Desarrollo. Comisión Europea
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2001 - Diciembre de 2003
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: -----
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Juan Andrés Bort
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 12

TÍTULO DEL PROYECTO: Design and Properties of New Polymeric Cluster Cyanide Solids with One, Two, and Three-Dimensionality (INTAS-2000-00689)
ENTIDAD FINANCIADORA: Comisión Europea (INTAS)
ENTIDADES PARTICIPANTES: Academia Rusa de las Ciencias, Universidad de San Petersburgo, Universidad de Bielefeld, Universidad de Rennes, Universitat Jaume I, Instituto de Química Inorgánica de Novosibirsk, Instituto de Química General e Inorgánica de Ucrania, Instituto de Metalurgia de Kazakhstan.
DURACIÓN: Enero de 2001 - Diciembre de 2003
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 6.000 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Achim Müller (Coordinador) /Rosa M. Llusar Barelles
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 4 (UJI)

TÍTULO DEL PROYECTO: Análisis de compuestos inorgánicos por difracción de rayos X (8I088.x)
ENTIDAD FINANCIADORA: Artículo 83
DURACIÓN: 1998-1999
PROFESORA RESPONSABLE: Rosa M. Llusar Barelles
Participación en varios subproyectos con la empresa "Corporación Química Vhem"

TÍTULO DEL PROYECTO: Recogida de datos de estructuras cristalinas con el difractor Bruker CCD Smart (0I010.x)
ENTIDAD FINANCIADORA: Artículo 83
DURACIÓN: 1999-2004
PROFESORA RESPONSABLE: Rosa M. Llusar Barelles
Participación en varios proyectos llevados a cabo en colaboración con distintos profesores: P. Lahuerta, E. Coronado, G. Asensio y M. Julve (U. de Valencia), L. Falvello y J. Forniés (U. de Zaragoza), G. López (U. Murcia).

TÍTULO DEL PROYECTO: Desarrollo de nuevos calcogenuros metálicos de metales del grupo 6 con propiedades de interés tecnológico (P1·1B2001-07)
ENTIDAD FINANCIADORA: Bancaixa-UJI
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Noviembre de 2001 – Octubre de 2004
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 12.602 euros (incluye 7.482 euros para personal)
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa M. Llusar Barelles
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 1

TÍTULO DEL PROYECTO: Síntesis, estructura y propiedades de clústeres metálicos de molibdeno, wolframio y renio con aplicaciones potenciales en catálisis y medicina (BQU2002-00313)
ENTIDAD FINANCIADORA: DGI-MCYT
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Noviembre de 2002 - Octubre de 2005
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 24.000 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa M. Llusar Barelles
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 4 (2,33 EDP)

TÍTULO DEL PROYECTO: Desarrollo de nuevos materiales inorgánicos con propiedades de interés tecnológico: estudio combinado teórico-experimental (CTIDIB/2002/330)
ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat Valenciana
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2002 - Diciembre de 2003
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 17.854,58 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Juan Andrés Bort
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 8

TÍTULO DEL PROYECTO: Estudio teórico-experimental de mecanismos de reacción en tioclústeres homo- y heterobimetálicos relevantes en catálisis (GV04B-029)
ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat Valenciana
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2004 - Noviembre de 2005
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 13.300 euros (2004), 3.000 euros (2005)
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Vicent Sixte Safont Villarreal
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 6

TÍTULO DEL PROYECTO: Ayudas para grupos de investigación, desarrollo e innovación: Grupo de Química Teórica y Computacional (GRUPOS4/28)
ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat Valenciana
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat de València y Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2004 - Diciembre de 2005
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 12.500 euros (2004), 7.500 euros (2005)
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Juan Andrés Bort
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 22

TÍTULO DEL PROYECTO: Diseño de clústeres quirales y su utilización en la transformación enantioselectiva de sustratos orgánicos (IIARCO/2004/163)
ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat Valenciana (Acción de articulación del SEVCTE)
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat de València y Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2004 - Diciembre de 2005
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 8.385 euros (2004), 3572'42 euros(2005)
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa María Llusar / Julia Pérez Prieto (responsable de la UV)
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 3 (UJI), 6 (total)

TÍTULO DEL PROYECTO: Nanociencia y nanotecnología molecular ((IARCO/2004/161)
ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat Valenciana (Acción de articulación del SEVCTE)
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat de València y Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de, 2004 - Diciembre de 2005
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 8.050 euros (2004), 3.429,70 euros (2005)
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa María Llusar /Carlos Gómez García (responsable de la UV)
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 5 (UJI), 14 (total)

TÍTULO DEL PROYECTO: Diseño de nuevos materiales moleculares basados en calcogenuros clúster homo- y heterometálicos y estudio teórico experimental del mecanismo de algunas de sus reacciones relevantes en catálisis y medicina (P1 1B2004-19)
ENTIDAD FINANCIADORA: Bancaixa-UJI
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2004 - Noviembre de 2007
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 22.504 euros (incluye 9.900 euros para personal)
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa María Llusar
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 3

TÍTULO DEL PROYECTO: Materiales moleculares con propiedades conductoras, magnéticas y/o catalíticas basados en clústeres calcogenuro de metales de los grupos 5 y 6 (CTQ2005-09270-C02-01).
ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Educación y Ciencia
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2006 - Diciembre de 2008
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 54.000 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa María Llusar
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 3

TÍTULO DEL PROYECTO: Coordinación de clústeres calcogenuro a ligandos electroactivos (Acción integrada hispano-francesa HF2005-0146)
ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Educación y Ciencia
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I y Universidad de Rennes (Francia)
DURACIÓN: Enero de 2006 - Diciembre de 2007
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 9.550 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa María Llusar
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 3

TÍTULO DEL PROYECTO: Materiales moleculares con propiedades conductoras, magnéticas y/o catalíticas basados en clústeres calcogenuros de metales de los grupos 5 y 6 (ACOMP06/241)
ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat Valenciana
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2006 - Diciembre de 2006
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 7.500 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa María Llusar
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 3

TÍTULO DEL PROYECTO: Multifunctional and Switchable Molecular Materials: Design, Synthesis, Characterization and Preparation of Thin Films (D35-WG/0011/05)
ENTIDAD FINANCIADORA: ESF-COST ACTION No.35
ENTIDADES PARTICIPANTES: ICMOL-U. de Valencia, ITN (Portugal), CNRS-Univ. de Angers (Francia), Davy Faraday Research Laboratory (GB), Institut de Ciencia de Materials de Barcelona, Leiden Institute of Chemistry (Holanda), Universidad de Rennes (Francia), Istituto di Struttura della Materia de Monterotondo (Italia), Nottingham Trent University (GB), Institute of Nanotechnology of Karlsruhe (Alemania)
DURACIÓN: Enero de 2006 - Diciembre de 2007
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 4.000 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Carlos Gómez-García
NÚMERO DE INVESTIGADORES: >30

TÍTULO DEL PROYECTO: Materiales moleculares con propiedades conductoras, magnéticas y/o catalíticas basados en clústeres calcogenuros de metales de los grupos 5 y 6 (ACOMP07/286)
ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat Valenciana
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2007 - Diciembre de 2007
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 4.400 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa Llusar
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 4

TÍTULO DEL PROYECTO: Materia a alta presión (CSD00C-07-30524)
ENTIDAD FINANCIADORA: MEC
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universidad Complutense de Madrid, CSIC-Rocasolano, Universidad de la Laguna, Universitat Jaume I, Universitat Autònoma de Barcelona, Universidad de Cantabria, ICMUV-Univ. de Valencia, Universidad de Oviedo, CSIC-Inst. del Frio, CSIC-INTA.
DURACIÓN: Enero, 2008 - Diciembre 2013
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 5.500.000 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Valentín García Baonza
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 75

TÍTULO DEL PROYECTO: Reactividad y estudios mecanísticos sobre calcogenuros clúster de metales del grupo 6 con aplicaciones potenciales en catálisis industrial y enzimática (P1 1B2007-12)
ENTIDAD FINANCIADORA: Bancaixa-UJI
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2008 - Noviembre de 2010
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 40.000 euros (incluye 11.100 euros para personal)
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa Llusar
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 5

TÍTULO DEL PROYECTO: Nuevos aspectos sobre la química de los calcogenos clúster de metales de transición dirigidos a sus aplicaciones en catálisis y electrónica molecular (CTQ2008-02670/BQU)
ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Ciencia e Innovación
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2009- Diciembre de 2011
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 84.700 euros (con una beca FPI)
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa Llusar
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 7

TÍTULO DEL PROYECTO: Nuevos aspectos sobre la química de los calcogenos clúster de metales de transición dirigidos a sus aplicaciones en catálisis (ACOMP/2009/105)
ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat Valenciana
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2009- Diciembre de 2009
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 5.000 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa Llusar
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 7

TÍTULO DEL PROYECTO: Química teórica y computacional de sistemas biológicos, sólidos y materiales moleculares (PROMETEO/2009/053)
ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat Valenciana
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2009- Diciembre de 2013
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 51.500 euros (2009); 78.000 (2010), 77.500 euros (2011).
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Juan Manuel Andres Bort
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 4

TÍTULO DEL PROYECTO: Nuevos aspectos sobre la química de los calcogenos clúster de metales de transición dirigidos a sus aplicaciones en catálisis (ACOMP/2010/276)
ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat Valenciana
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2010- Diciembre de 2010
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 8.000 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa Llusar
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 7

TÍTULO DEL PROYECTO: Complejos clúster como precursores de especies activas en procesos catalíticos homogéneos y heterogéneos (P1.1B2010-46)
ENTIDAD FINANCIADORA: Bancaixa-UJI
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2011- Diciembre de 2013
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 38.000 euros (incluye 11.100 euros para personal)
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa Llusar
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 4

TÍTULO DEL PROYECTO: Nuevos aspectos sobre la química de los calcogenuros clúster de metales de transición dirigidos a sus aplicaciones en catálisis (ACOMP/2011/037)
ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat Valenciana
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2011- Diciembre de 2011
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 8.000 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa Llusar
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 4

TÍTULO DEL PROYECTO: Funcionalización de calcogenuros clúster de metales de transición de los grupos 6 y 7 dirigida al desarrollo de materiales moleculares y soportados con aplicaciones en catálisis homogénea (CTQ2011-23157)
ENTIDAD FINANCIADORA: MINECO
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2012- Diciembre de 2014
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 134.310 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa Llusar
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 5

TÍTULO DEL PROYECTO: Funcionalización de calcogenuros clúster de metales de los grupos 6 y 7 dirigida al desarrollo de materiales moleculares y soportados con aplicaciones en catálisis orgánica, catálisis fotoinducida y electrónica molecular (ACOMP/2013/215)
ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat Valenciana
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2013- Diciembre de 2013
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 3450 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa Llusar
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 5

TÍTULO DEL PROYECTO: Producción y almacenamiento de hidrógeno catalizada por complejos clúster de sulfuro de molibdeno y wolframio (P1.1B2013-14/2013)
ENTIDAD FINANCIADORA: Universitat Jaume I
ENTIDADES PARTICIPANTES: Universitat Jaume I
DURACIÓN: Enero de 2014- Diciembre de 2016
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 28.817 euros
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Rosa Llusar
NÚMERO DE INVESTIGADORES: 5

PUBLICACIONES

Indicar volumen, páginas inicial y final (año) y clave.

CLAVE: L= libro completo, CL= capítulo libro, A= artículo, R= review, E= editor

INVESTIGADOR PRINCIPAL: IP (subrayado)

1. AUTORES: F. Albert Cotton, Rosa Llusar, David O. Marler, Willi Schwotzer
 TÍTULO: New Reaction converting the $\text{Mo}_3(\mu_3\text{-S})(\mu\text{-S})_2$ Core to the $\text{Mo}_3(\mu_3\text{-S})(\mu\text{-S})_3$ Core: Structure of the $\{\text{Mo}_3(\mu_3\text{-S})(\mu\text{-S})_3[\text{N}(\text{CH}_2\text{CO}_2)_3]_3(\text{H}_2)\}^{3-}$ Ion.
 REFERENCIA: Inorg. Chim. Acta **1985**, 102, L25-L27. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.454 (1998)
 PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 46
2. AUTORES: F. Albert Cotton, Zvi Dori, Rosa Llusar, Willi Schwotzer
 TÍTULO: The $\text{Mo}_3\text{S}_4^{4+}$ Aquo Ion.
 REFERENCIA: J. Am. Chem. Soc. **1985**, 107, 6734-6735. ÍNDICE DE IMPACTO: 5.725 (1998)
 PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 81
3. AUTORES: F. Albert Cotton, Michel P. Diebold, Zvi Dori, Rosa Llusar, Willi Schwotzer
 TÍTULO: The Cuboidal $\text{Mo}_4\text{S}_4^{6+}$ Aquo Ion and its derivatives.
 REFERENCIA: J. Am. Chem. Soc. **1985**, 107, 6735-6736. ÍNDICE DE IMPACTO: 5.725 (1998)
 PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 39
4. AUTORES: Francisco Barceló, F. Albert Cotton, Pascual Lahuerta, Rosa Llusar, Mercedes Sanau, Willi Schwotzer, M. Ángeles Úbeda
 TÍTULO: Synthesis and Structure of the Ortho-Metalated Dirhodium (II) Compound $\text{Rh}_2(\text{O}_2\text{CCH}_3)_3[(\text{C}_6\text{H}_4)\text{P}(\text{C}_6\text{H}_5)(\text{C}_6\text{F}_4\text{Br})]$. $\text{P}(\text{C}_6\text{H}_5)_2(\text{C}_6\text{F}_4\text{Br})$.
 REFERENCIA: Organometallics **1986**, 5, 808-811. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.471 (1998)
 PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 51
5. AUTORES: Zvi Dori, F. Albert Cotton, Rosa Llusar, Willi Schwotzer
 TÍTULO: A Mixed Oxo-thio-bridged Tritisungsten Triangular Cluster Complex.
 REFERENCIA: Polyhedron **1986**, 5, 907-909. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.335 (1998)
 PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 23
6. AUTORES: F. Albert Cotton, Zvi Dori, Rosa Llusar, Willi Schwotzer
 TÍTULO: Derivatization of the Cuboidal Mo_4S_4 - Aquo Ion: Preparation and Structure of $\text{Mo}_4\text{S}_4(\text{HBpz}_3)_4(\text{pz})[\text{pz}=\text{pyrazolyl}, \text{C}_3\text{N}_2\text{H}_3^-]$.
 REFERENCIA: Inorg. Chem. **1986**, 25, 3529-3532. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.965 (1998)
 PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 21
7. AUTORES: F. Albert Cotton, Larry R. Falvello, Rosa Llusar, Eduardo Llibby, Carlos A. Murillo, Willi Schwotzer
 TÍTULO: Synthesis and Characterization of Four Vanadium (II) Compounds, Including Vanadium (II) Sulfate Hexahydrate and various Vanadium (II) Saccharinates.
 REFERENCIA: Inorg. Chem. **1986**, 25, 3423-3428. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.965 (1998)
 PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 93
8. AUTORES: F. Albert Cotton, Zvi Dori, Rosa Llusar, Willi Schwotzer
 TÍTULO: Oxidative Fragmentation of the Cuboidal Mo_4S_4 Cluster Core: Synthesis and Structures of $[\text{Mo}_3(\mu_3\text{-S})(\mu\text{-S})_3(\text{I}^-\text{aneN}_3)_3]^{4+}$ and $[\text{MoO}(\text{I}^-\text{aneN}_3)_2(\mu\text{-S})_2]^{2+}$.
 REFERENCIA: Inorg. Chem. **1986**, 25, 3654-3658. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.965 (1998)
 PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 38

-
9. AUTORES: F. Albert Cotton, Michael P. Diebold, Rosa Llusar, Wieslaw J. Roth.
 TÍTULO: New Chemistry of Oxo Trinuclear, Metal-Metal Bonded Niobium Compounds.
 REFERENCIA: J.Chem.Soc.Chem. Commun. **1986**, 1276-1278.
 PAÍS: U. E. CLAVE: A ÍNDICE DE IMPACTO: 5.141 (1998)
 N° CITAS: 29
-
10. AUTORES: F. Albert Cotton, Rosa Llusar
 TÍTULO: Direct Synthesis from MoCl₃(THF)₃ of a Complex containing the [Mo₃S₄]⁴⁺ core.
 REFERENCIA: Polyhedron **1987**, 6, 1741-1745. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.335 (1998)
 PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 34
-
11. AUTORES: J. C. Besteiro, P. Lahuerta, M. Sanaú, I. Solana, F. Albert Cotton, Rosa Llusar, W. Schwotzer
 TÍTULO: C-Br Insertion Reactions in Rhodium and Iridium Compounds Containing an Ortho-halo-arylphosphine. X-ray Structures of two Ortho-metalated Compounds of Formula IrX₂[P(C₆F₄)Ph₂][P(oBrC₆F₄)Ph₂], X=Cl, Br.
 REFERENCIA: Polyhedron **1988**, 2, 87-96. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.355 (1998)
 PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 6
-
12. AUTORES: M. Köppen, G. Fresen, K. Wieghardt, R. Llusar, B. Nuber, J. Weiss
 TÍTULO: Syntheses, Spectroscopic and Magnetic Properties of Novel Binuclear Vanadium (III)/(IV) Complexes. Crystal Structures of [L₂V₂(μ-O)(μ-CH₃CO₂)₂]I₂ and [L₂V₂O₂(μ-CH₃CO₂)₂]I₂ (L= N, N', N''-Trimethyl-1,4, triazacyclononane)
 REFERENCIA: Inorg. Chem. **1988**, 27, 721-727. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.965 (1998)
 PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 16
-
13. AUTORES: F. A. Cotton, F. Barcelo, P.Lahuerta, R. Llusar, J. Payá, M. A. Ubeda
 TÍTULO: Ortho-Metalation Reactions in Binuclear Dirhodium Compounds Synthesis and Molecular Structure of an unsymmetrical Rh₂⁴⁺ Compound with two Different Ortho-Metalated Phosphines.
 REFERENCIA: Inorg. Chem. **1988**, 27, 1010-1013. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.965 (1998)
 PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 22
-
14. AUTORES: F. A. Cotton, R. Llusar
 TÍTULO: A New Synthetic Entry to Tungsten-Sulfur Cluster Chemistry. Preparation and Structure of [W₃S₄Cl₃(dmpe)₃]⁺.
 REFERENCIA: Inorg. Chem. **1988**, 27, 1303-1305. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.965 (1998)
 PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 24
-
15. AUTORES: F. A. Cotton, R. Llusar
 TÍTULO: Structural Characterization of two Oxotungsten (IV) Complexes.
 REFERENCIA: Acta Cryst **1988**, C44, 952-955. ÍNDICE DE IMPACTO: 0.557 (1998)
 PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 8
-
16. AUTORES: R. Usón, J. Fornies, M. Tomas, J. M. Casas, F. A. Cotton, L. Falvello, R. Llusar
 TÍTULO: Synthesis, X-Ray Structure and Reactivity of (NBu₄)₂[Pt₂(μC₆F₅)(C₆F₅)₄].H₂O and (NBu₄)[Pt₂Ag(μ-C₆F₅)₂(C₆F₅)₄O(C₂H₅)₂]. The first complexes containing bridging Pentafluorophenyl Groups.
 REFERENCIA: Organometallics **1988**, 7, 2279-2285. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.471 (1998)
 PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 54
-

-
17. AUTORES: F. A. Cotton, Rosa Llusar, Willi Schwotzer
TÍTULO: A Novel Compound Containing Coupled Mo₃S₄ Clusters, [Mo₃S₄(HBpz₃)₂]₂(μ-O)(μ-C₃H₃N₂)₂.
REFERENCIA: Inorg. Chim. Acta **1989**, 155, 231-236. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.454 (1998)
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 8
-
18. AUTORES: F. A. Cotton, Rosa Llusar, Cassandra T. Eagle
TÍTULO: Triangular Trinuclear Cluster Compounds: Molybdenum and Tungsten Complexes of the Type [M₃S₄(diphos)₃X₃]⁺ with X= Cl and H.
REFERENCIA: J. Am. Chem. Soc. **1989**, 111, 4332-4338. ÍNDICE DE IMPACTO: 5.725 (1998)
PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 54
-
19. AUTORES: Rosa Llusar, John D. Corbett
TÍTULO: Reduced Praseodymium Cluster Bromides Stabilized by Transition Metals
REFERENCIA: Inorg. Chem. **1994**, 33, 849-853. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.965 (1998)
PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 41
-
20. AUTORES: J. Andrés, A. Beltrán, J. A. Igualada, R. Llusar, V. Moliner
TÍTULO: Ab initio Perturbed Ion Calculation on Ni²⁺•KZnF₃ and Ni²⁺•KMgF₃. A Structural Study.
REFERENCIA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **1995**, 330, 319-323. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.048 (1998)
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 1
-
21. AUTORES: J. Andrés, A. Beltrán, J. A. Igualada, R. Llusar, V. Moliner
TÍTULO: Ionic Structures as Intercalation Compounds Host Lattices. An Ab Initio Perturbed Ion Study on Lattice Stretching.
REFERENCIA: J. Mol. Struct. THEOCHEM **1995**, 330, 313-317. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.048 (1998)
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 1
-
22. AUTORES: J. Andrés, A. Beltrán, R. Llusar.
TÍTULO: Theoretical Study on Lattice Stability and Selective Doping Effects of V⁴⁺ and Tb⁴⁺ in a Scheelite ZrGeO₄ Lattice.
REFERENCIA: Chem. Phys. Lett. **1995**, 236, 521-531. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.257 (1998)
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 2
-
23. AUTORES: R. Llusar, A. Beltrán, J. Andrés, B. Silvi, A. Savin
TÍTULO: Pseudopotential Periodic Hartree Fock Study of K₈In₁₁ and Rb₈In₁₁ Systems.
REFERENCIA: J. Phys. Chem. **1995**, 99, 12483-12487. ÍNDICE DE IMPACTO: 4.173 (1998)
PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 7
-
24. AUTORES: A. Beltrán, J. A. Igualada, R. Llusar, J. Andrés.
TÍTULO: MgAl₂O₄ Spinel Crystal Structures. An Ab Initio Perturbed Ion Study.
REFERENCIA: Int. J. of Quantum Chem. **1995**, 29, 685-694. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.27 (1998)
PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 5
-
25. AUTORES: F. A. Cotton, Lee M. Daniels, Maoyu Shang, Rosa Llusar, Willi Schwotzer
TÍTULO: A Trinuclear Cluster of Molybdenum(IV),
Mo₃(μ₃-S)(μ₂-S)₃(HC₂O₄)₂(C₂O₄)(H₂O)₃
REFERENCIA: Acta Cryst. C **1996**, C52, 835-838 ÍNDICE DE IMPACTO: 0.557 (1998)
PAÍS: U.E. CLAVE: A N° CITAS: 1
-

-
26. AUTORES: Rosa Llusar, Marcos Casarrubios, Zoila Barandiarán, Luis Seijo
TÍTULO: Ab initio Model Potential Calculations on the Local Structure and Electronic Spectrum of Ni²⁺-Doped MgO including Correlation, Spin-Orbit and Embedding Effects
REFERENCIA: J. Chem. Phys. **1996**, 105, 5321-5330. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.147 (1998)
PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 55
-
27. AUTORES: A. C. Camargo, J. A. Igualada, A. Beltrán, R. Llusar, E. Longo, J. Andrés.
TÍTULO: An Ab Initio Perturbed Ion Study of Structural Properties of TiO₂, SnO₂ and GeO₂ Rutile Lattices.
REFERENCIA: Chem. Phys. **1996**, 212, 381-391. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.707 (1998)
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 18
-
28. AUTORES: M. Cerqueira, R. S. Nasar, E. Longo, J.A. Varela, A. Beltrán, R. Llusar, J. Andrés.
TÍTULO: Piezoelectric Behavior of PZT Doped with Calcium. A Combined Experimental and Theoretical Study.
REFERENCIA: J. Mater. Sci. **1997**, 32, 2381-2386. ÍNDICE DE IMPACTO: 0.632 (1998)
PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 6
-
29. AUTORES: J. Mata, S. Uriel, E. Peris, R. Llusar, S. Houbrechts, A. Persoons
TÍTULO: Synthesis and Characterization of New Ferrocenyl Heterobimetallic Compounds with High NLO Responses.
REFERENCIA: J. Organomet. Chem. **1998**, 562, 197-202. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.612
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 75
-
30. AUTORES: R. Llusar, J. Mata, E. Peris y M. Köckerling
TÍTULO: The Oxotungsten (IV) Complex [WOCl(Ph₂PCH₂CH₂Ph)₂]PF₆. CHCl₃
REFERENCIA: Acta Cryst. Sec. C **1999**, C45, 506-508. ÍNDICE DE IMPACTO: 0.581
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: -
-
31. AUTORES: Rosa Llusar, Armando Beltrán, Juan Andrés, Stéphane Noury, Bernard Silvi.
TÍTULO: Topological analysis of electron density in depleted homopolar chemical bonds
REFERENCIA: J. Comput. Chem. **1999**, 20, 1517-1526. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.052
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 64
-
32. AUTORES: José A. Mata, Santiago Uriel, Rosa Llusar, Eduardo Peris
TÍTULO: Preparation, properties and crystal structure of new conjugated oligomers with a pendant ferrocenyl and an end-capped pyridine.
REFERENCIA: Organometallics **2000**, 19, 3797-3802. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.169
PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 38
-
33. AUTORES: José A. Mata, Eva Falomir, Rosa Llusar, Eduardo Peris
TÍTULO: Preparation, properties and coordination of new conjugated ferrocenyl-based ligands with an end-capped nitrile
REFERENCIA: J. Organomet. Chem. **2000**, 616, 80-88. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.632
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 27
-

-
34. AUTORES: F. Estevan, M. Feliz, R. Llusar, J. A. Mata, S. Uriel
TÍTULO: High yield synthesis of trinuclear $[M_3S_4X_3(\text{diphos})_3]^+$ (M=Mo, W; X=Cl, Br and diphos=dmpe, dppe) molecular clusters from solid state materials. Synthesis and structure of $[W_3S_4H_3(\text{diphos})_3](BPh_4)$.
REFERENCIA: Polyhedron **2001**, 20, 527-535. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.200
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 28
-
35. AUTORES: R. Lescouëzec, F. Lloret, M. Julve, J. Vaissermann, M. Verdager, R. Llusar, S. Uriel
TÍTULO: $[Fe(\text{phen})(CN)_4]^-$: A Versatile Building Block for the Design of Heterometallic Systems. Crystal Structures and Magnetic Properties of $PPh_4[Fe(\text{phen})(CN)_4] \cdot 2H_2O$ and $[{Fe}(\text{phen})(CN)_4]_2M(H_2O)] \cdot 4H_2O$ [phen= 1,10 Phenanthroline; M= Mn(II) and Zn(II)]
REFERENCIA: Inorg. Chem. **2001**, 40, 2065-2072. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.946
PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 82
-
36. AUTORES: L. R. Falvello, S. Fernández, C. Larraz, R. Llusar, R. Navarro, E. Urriolabeitia
TÍTULO: C-H Activation in Phosphonium Salts Promoted by Pt (II) Complexes
REFERENCIA: Organometallics **2001**, 20, 1424-1436. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.182
PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 22
-
37. AUTORES: José A. Mata, Eduardo Peris, Rosa Llusar, Santiago Uriel, Marie P. Cifuentes, Mark G. Humphrey, Marek Samoc, Barry Luther-Davies
TÍTULO: Synthesis, Structures and Nonlinear Optical Properties of Ferrocenyl Complexes with Arylethenyl Substituents
REFERENCIA: Eur. J. Inorg. Chem. **2001**, 2113-2122. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.475
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 27
-
38. AUTORES: José A. Mata, Eduardo Peris, Santiago Uriel, Rosa Llusar, Inge Asseberghs, André Persoons.
TÍTULO: Preparation and Properties of New Ferrocenyl Heterobimetallic Complexes with Counterion Dependent NLO Responses
REFERENCIA: Polyhedron **2001**, 20, 2083-2088. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.200
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 17
-
39. TUTORES: R. Llusar, A. Beltrán, J. Andrés, F. Fuster, B. Silvi
TÍTULO: Topological Analysis of Multiple Metal-Metal Bonds in Dimers of the $M_2(\text{formamidinate})_4$ Type with M=Nb, Mo, Tc, Ru, Rh and Pd
REFERENCIA: J. Phys Chem. A **2001**, 105, 9460-9466. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.630
PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 34
-
40. AUTORES: M. Feliz, J. M. Garriga, R. Llusar, S. Uriel, M. G. Humphrey, N. T. Lucas, M. Samoc, B. Luther-Davies.
TÍTULO: Synthesis, Structure and Optical Limiting Properties of Heterometallic $[M_3CuS_4]$ Cuboidal Clusters (M=Mo, W) with Terminal Phosphine Ligands.
REFERENCIA: Inorg. Chem. **2001**, 40, 6132-6138. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.946
PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 35
-

-
41. AUTORES: Rosa Llusar, Santiago Uriel, Cristian Vicent
TÍTULO: Transition metal incorporation into seleno-bridged cubane type clusters of molybdenum and tungsten. X-ray crystal structures of the first [Mo₃CuSe₄] derivatives.
REFERENCIA: Dalton Trans. **2001**, 19, 2813-2818. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.820
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 18
-
42. AUTORES: Rodrigue Lescouëzec, Gabriela Marinescu, M. Camen Muñoz, Dominique Luneau, Marius Andruch, Francesc Lloret, Juan Faus, Miguel Julve, José Antonio Mata, Rosa Llusar, Joan Cano.
TÍTULO: [Cr(dpa)(ox)₂]: A New Bis-Oxalato Building Block for the Design of Heteropolymetallic Systems. Crystal Structures and Magnetic Properties of PPh₄[Cr(dpa)(ox)₂], AsPh₄[Cr(dpa)(ox)₂], Hdpa[Cr(dpa)(ox)₂].4H₂O, Rad[Cr(dpa)(ox)₂]. H₂O and Sr[Cr(dpa)(ox)₂].8H₂O (dpa=2,2'-dipyridylamine)
REFERENCIA: New J. Chem. **2001**, 10, 1224-1235. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.440
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 27
-
43. AUTORES: Erwan Le Grogneç, Rinaldo Poli, Philippe Richard, Rosa Llusar, Santiago Uriel
TÍTULO: Interaction of Half-Sandwich Alkylmolybdenum(III) Complexes with B(C₆F₅)₃. The X-ray Structure of [CpMo(η⁴-C₆H₄)(μ-Cl)(μ-CH₂)(O)MoCp][CH₃B(C₆F₅)₃]
REFERENCIA: J. Organomet. Chem. **2001**, 640, 113-120. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.803
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 2
-
44. AUTORES: Eugenio Coronado, Marta Feliz, Alicia Forment-Aliaga, Carlos J. Gómez-García, Rosa Llusar, Francisco M. Romero.
TÍTULO: Towards Multifunctional Single-Molecule Magnets: Characterization of Dodecanuclear Manganese Complexes by Electrospray Ionization Mass Spectrometry (ESI-MS)
REFERENCIA: Inorg. Chem. **2001**, 40, 6084-6085. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.946
PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 22
-
45. AUTORES: Gabriela Marinescu, Rodrigue Lescouëzec, Donatella Armentano, Giovanni De Munno, Marius Andruch, Santiago Uriel, Rosa Llusar, Francesc Lloret, Miguel Julve.
TÍTULO: [Cr(bpym)(C₂O₄)₂] in designing heterometallic complexes: Crystal Structures and Magnetic Properties of PPh₄[Cr(bpym)(C₂O₄)₂].H₂O and [Ag(bpym)]-[Cr(C₂O₄)₂(H₂O)₂].H₂O (bpym = 2,2'-bipyrimidine)
REFERENCIA: Inorg. Chim. Acta **2002**, 336, 46-54. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.566
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 25
-
46. AUTORES: Marta Feliz, Rosa Llusar, Juan Andrés, Slawomir Beski, Bernard Silvi
TÍTULO: Topological analysis of the bond in incomplete cuboidal [Mo₃S₄] clusters
REFERENCIA: New J. Chem. **2002**, 26, 844-850. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.060
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 14
-
47. AUTORES: Victorio Cadierno, Salvador Conejero, M. Pilar Gamasa, José Gimeno, Larry R. Falvello, Rosa Llusar
TÍTULO: In Search of Optically Active γ-Keto Acetylenes via Regioselective Coupling of Allenylidene Groups and Cyclic Enolates
REFERENCIA: Organometallics **2002**, 21, 3716-3726. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.215
PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 31
-

-
48. AUTORES: Maxim N. Sokolov, Rita Hernández-Molina, Danil N. Dybtsev, Elena V. Chuvarova, Sergei F. Solodovnikov, Natalia V. Pervukhina, Cristian Vicent, Rosa Llusar, Vladimir Fedin
- TÍTULO: Coordination of Phenylsulfinate PhSO₂⁻ to Mo₃MS₄⁴⁺ (M= Ni, Pd)
- REFERENCIA: Z. Anorg. Allg. Chem. **2002**, 628, 2335-2339. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.196
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 21
-
49. AUTORES: Marta Feliz, Rosa Llusar, Santiago Uriel, Cristian Vicent, Mark G. Humphrey, Nigel T. Lucas, Marek Samoc, Barry Luther-Davies.
- TÍTULO: Solid State Synthesis, Structure and Optical Limiting Properties of Seleno Cuboidal Clusters [M₃Se₄X₃(diphosphine)₃]⁺ (M=Mo, W; X=Cl, Br)
- REFERENCIA: Inorg. Chim. Acta. **2003**, 349, 69-77. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.578
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 12
-
50. AUTORES: Rosa Llusar, Santiago Uriel
- TÍTULO: Heterobimetallic chalcogen bridged cubane-type clusters of molybdenum and tungsten containing first row transition metals
- REFERENCIA: Eur. J. Inorg. Chem. **2003**, 1271- 1290. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.482
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 57
-
51. AUTORES: Larry R. Falvello, Rosa Llusar, Marina E. Margalejo, Rafael Navarro, Esteban P. Urriolabeitia
- TÍTULO: Stabilized Bis-ylides as a Source of Carbene Ligands in Palladium(II) and Platinum(II) Complexes.
- REFERENCIA: Organometallics **2003**, 22, 1132-1144. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.375
- PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 12
-
52. AUTORES: Yuri V. Mironov, O. A. Efremova, V. E. Fedorov, O. Oeckler, A. Simon., C. Vicent, R. Llusar
- TÍTULO: New coordination cyano-bridged polymers based on tetranuclear rhenium chalcocyanide clusters and copper (II) ammonia complexes
- REFERENCIA: Russ. Chem. Bull. **2003**, 52, 1698-1701. ÍNDICE DE IMPACTO: 0.603
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 8
-
53. AUTORES: Konstantin A. Brylev, Nikolai G. Naumov, O., Gabriel Peris, Rosa Llusar, Vladimir.E. Fedorov
- TÍTULO: Novel inorganic ionic compounds based on the Re₆ chalcocyanide cluster complexes: synthesis and crystal structures of [Cu(trien)NH₃]₂[Re₆S₈(CN)₆]·7H₂O, [Cu(trien)NH₃]₂[Re₆Se₈(CN)₆] and [Cu(trien)NH₃]₂[Re₆Te₈(CN)₆]·H₂O
- REFERENCIA: Polyhedron **2003**, 22, 3383-3387. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.584
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 10
-
54. AUTORES: Juan M. Garriga, Rosa Llusar, Santiago Uriel, Cristian Vicent, Alistair J. Usher, Nigel T. Lucas, Mark G. Humphrey, Marek Samoc
- TÍTULO: Synthesis and third-order nonlinear optical properties of [Mo₃(μ₃-S)(μ₂-S₂)]⁴⁺ clusters with maleonitriledithiolate, oxalate and thiocyanate ligands.
- REFERENCIA: Dalton Trans. **2003**, 23, 4546-4551. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.908
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 10
-

-
55. AUTORES: Alicia Forment-Aliaga, Eugenio Coronado, Marta Feliz, Alejandro Gaita-Ariño, Rosa Llusar, Francisco M. Romero.
- TÍTULO: Cationic Mn₁₂ Single-Molecule Magnets and Their Polyoxometalate Hybrid Salts
- REFERENCIA: Inorg. Chem. **2003**, 42, 8019-8027. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.389
- PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 24
-
56. AUTORES: Maxim N. Sokolov, Elena V. Chuvarova, Alexander V. Virovets, Rosa Llusar and Vladimir Fedin
- TÍTULO: Reactivity of Mo₃PdS₄⁴⁺ Cluster: Evidence for New Ligands PhP(OH)₂ and Ph₂P(OH) and Structural Characterization of [Mo₃(Pd(PPh₃)₄(H₂O)₅Cl₄)] · 0.5CH₃OH · 3H₂O
- REFERENCIA: J. Clust. Sci. **2003**, 14, 227-234. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.229
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 10
-
57. AUTORES: Maxim N. Sokolov, Tatyana V. Mitkina, Olga A. Gerasko, Vladimir Fedin, Alexander V. Virovets y Rosa Llusar
- TÍTULO: Coordination of Bismuth(III) to Cucurbit[8]uril. Preparation and X-ray Structure of {Bi(NO₃)(H₂O)₅}₂(Q₈)[Bi(NO₃)₃(H₂O)₄]₂[Bi(NO₃)₅]₂·Q₈·19H₂O
- REFERENCIA: Z. Anorg. Allg. Chem. **2003**, 2440-2442. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.127
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 10
-
58. AUTORES: Manuel G. Basallote, Marta Feliz, M. Jesús Fernández-Trujillo, Rosa Llusar, Vicent S. Safont, Santiago Uriel.
- TÍTULO: Mechanism of the reaction of the [W₃S₄H₃(dmpe)₃]⁺ cluster with acids: Evidence for the acid-promoted substitution of coordinated hydrides and the effect of the attacking species on the kinetics of protonation of the metal-hydride bonds
- REFERENCIA: Chem. Eur. J. **2004**, 10, 1463-1471. ÍNDICE DE IMPACTO: 4.517
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 17
-
59. AUTORES: Maxim N. Sokolov, Olga A. Gerasko, Danil N. Dybtsev, Elena V. Chuvarova, Alexander V. Virovets, Cristian Vicent, Rosa Llusar, Dieter Fenske, Vladimir Fedin
- TÍTULO: Supramolecular chemistry based on [W₃S₄(H₂O)₆Cl₃]⁻ a versatile building block
- REFERENCIA: Eur. J. Inorg. Chem. **2004**, 63-68. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.336
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 9
-
60. AUTORES: A. Waskowska, L. Gerward, J. Staun Olsen, M. Feliz, R. Llusar, L. Gracia, M. Marqués, J. M. Recio
- TÍTULO: High-Pressure behavior of selenium based spinels and related structures- an experimental and theoretical study.
- REFERENCIA: J. Phys.: Condens. Matter **2004**, 16, 53-63. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.049
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 11
-
61. AUTORES: Manuel G. Basallote, Francisco Estevan, Marta Feliz, M. Jesús Fernández-Trujillo, Dora A. Hoyos, Rosa Llusar, Santiago Uriel, Cristian Vicent.
- TÍTULO: Synthesis and Structure of the Incomplete Cuboidal Clusters [W₃Se₄H₃(dmpe)₃]⁺, [W₃Se₄H_{3-x}(OH)_x(dmpe)₃]⁺ and [W₃Se₄(OH)₃(dmpe)₃]⁺, and the mechanism of the acid-assisted substitution of the coordinated hydrides.
- REFERENCIA: Dalton Trans. **2004**, 530-536. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.926
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 11
-

-
62. AUTORES: Rita Hernández-Molina, Maxim Sokolov, Pedro Esparza, Cristian Vicent, Rosa Llusar
- TÍTULO: Aqueous solution chemistry of $[\text{Mo}_3\text{CuSe}_4]^{n+}$ ($n= 4, 5$) and $[\text{W}_3\text{CuQ}_4]^{5+}$ ($\text{Q}= \text{S, Se}$) clusters
- REFERENCIA: Dalton Trans. **2004**, 847-851. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.926
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 12
-
63. AUTORES: Marta Feliz, Rosa Llusar, Santiago Uriel, Cristian Vicent, Eugenio Coronado and Carlos J. Gómez-García
- TÍTULO: Cubane-type Mo_3CoS_4 Molecular Clusters with Three Different Metal Electron Populations: Synthesis, Structure, reactivity and Their Use in the Synthesis of Hybrid Charge-transfer Salts
- REFERENCIA: Chem. Eur. J. **2004**, 10, 4308-4314. ÍNDICE DE IMPACTO: 4.517
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 14
-
64. AUTORES: Eugenio Coronado, José R. Galán-Mascarós, Carlos Giménez-Saiz, Carlos J. Gómez-García, Eugenia Martínez-Ferrero, Manuel Almeida, Elsa B. Lopes, Silvia C. Capelli, Rosa M. Llusar
- TÍTULO: New conducting radical salts based upon Keggin-type polyoxometalates and perylene
- REFERENCIA: J. Mater. Chem. **2004**, 14, 1867-1872. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.721
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 16
-
65. AUTORES: Irina V. Kalinina, Alexander V. Virovets, Fedor M. Dolgushin, Mikhail Yu. Antipin, Rosa Llusar, Vladimir Fedin
- TÍTULO: Synthesis and Crystal Structures of Cyano-Bridged Cluster-Metal Layered Coordination Polymers $[\text{Cu}(\text{dien})]_3[\text{W}_4\text{Te}_4(\text{CN})_{12}] \cdot 12\text{H}_2\text{O}$ and $[\text{Ni}(\text{en})]_3[\text{W}_4\text{Se}_4(\text{CN})_{12}] \cdot 7.5\text{H}_2\text{O}$
- REFERENCIA: Inorg. Chim. Acta. **2004**, 357, 3390-3396. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.554
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 5
-
66. AUTORES: Rosa Llusar, Santiago Uriel, Cristian Vicent, Juan M. Clemente-Juan, Eugenio Coronado, Carlos J. Gómez-García, Benoit Braïda, Enric Canadell
- TÍTULO: Single-Component Magnetic Conductors Based on Mo_3S_7 Trinuclear Clusters with Outer Dithiolate Ligands
- REFERENCIA: J. Am. Chem. Soc. **2004**, 126, 12076-12083. ÍNDICE DE IMPACTO: 6.903
- PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 30
-
67. AUTORES: T. V. Mitkina, D. Yu Naumov, O. A. Gerasko, F. M. Dolgushin, C. Vicent, R. Llusar, M. N. Sokolov, V. P. Fedin
- TÍTULO: Inclusion of Ni(II) and Copper (II) Complexes with Aliphatic Polyamines in Cucurbit[8]uril.
- REFERENCIA: Russ. Chem. Bull. **2004**, 53, 2519-2524. ÍNDICE DE IMPACTO: 0.529
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 12
-
68. AUTORES: Gabriela Marinescu, Marius Andruch, Miguel Julve, Francesc Lloret, Rosa Llusar Santiago Uriel, Jacqueline Vaissermann
- TÍTULO: Heteropolymetallic Supramolecular Solid-state Architectures Constructed from $[\text{Cr}(\text{AA})(\text{C}_2\text{O}_4)_2]^-$ Tectons, and Sustained by Coordinative, Hydrogen Bond and π - π Stacking Interactions ($\text{AA} = 2,2'$ -bipyrimidine, 1-10 phenantroline)
- REFERENCIA: Cryst. Growth Des. **2005**, 5, 261-267. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.551
- PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 37
-

-
69. AUTORES: Juan Andrés, Slawomir Berski, Marta Feliz, Rosa Llusar, Fabricio Sensato, Bernard Silvi
TÍTULO: The Nature of the Chemical Bond in Di- and Polynuclear Metal Cluster Complexes as Depicted by the Analysis of the Electron Localization Function
REFERENCIA: C. R. Chimie- special issue **2005**, 8, 1400-1412. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.557
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 9
-
70. AUTORES: Rosa Llusar, Sonia Triguero, Santiago Uriel, Cristian Vicent, Eugenio Coronado, Carlos J. Gómez-García
TÍTULO: Synthesis, Crystal Structure and Properties of Multicomponent Bis(ethylenedithio)tetrathiafulvalene (ET) Charge Transfer Salts of the $[\text{Mo}_3\text{S}_7\text{Br}_6]^{2-}$ Cluster
REFERENCIA: Inorg. Chem., **2005**, 44, 1563-1570. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.851
PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 14
-
71. AUTORES: M. Sokolov, P. Esparza, R. Hernández-Molina, A. Mederos, J. G. Platas, J. A. Gavin, R. Llusar, C. Vicent.
TÍTULO: Preparation and properties of the full series of cuboidal clusters $[\text{Mo}_x\text{W}_{4-x}\text{Se}_4(\text{H}_2\text{O})_{12}]^{n+}$ ($n=4-6$) and their derivatives
REFERENCIA: Inorg. Chem., **2005**, 44, 1132-1141. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.851
PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 8
-
72. AUTORES: Marta Feliz, Rosa Llusar, Santiago Uriel, Cristian Vicent, Michael Brorson, Honrad Herbst
TÍTULO: Heterobimetallic cuboidal $[\text{Mo}_3\text{NiS}_4]$ and $[\text{W}_3\text{NiS}_4]$ cluster diphosphane complexes as molecular models in hydrodesulfurization catalysis
REFERENCIA: Polyhedron. **2005**, 24, 1212-1220. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.957
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 14
-
73. AUTORES: Rosa Llusar, Maxim Sokolov, Cristian Vicent
TÍTULO: $\text{Mo}_3\text{ReS}_4(\text{O})_2(\text{S}_2\text{P}(\text{OEt})_2)_5$: an example of chalcogenide cluster with a highly oxidized $\text{Mo}_3\text{ReS}_4^{9+}$ core
REFERENCIA: C. R. Chimie- special issue, **2005**, 8, 1815-1819. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.577
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 1
-
74. AUTORES: Maxim N. Sokolov, Elena V. Chubarova, Rita Hernández-Molina, María Clausén, Dimitri Yu. Naumov, Cristian Vicent, Rosa Llusar, Vladimir P. Fedin.
TÍTULO: A new series of homologous cluster complexes $[\text{Mo}_3(\text{M}'\text{EPh}_3)\text{Q}_4\text{Cl}_4(\text{H}_2\text{O})_5]$ ($\text{M}' = \text{Ni}, \text{Pd}; \text{E} = \text{P}, \text{As}; \text{Q} = \text{S}, \text{Se}$)
REFERENCIA: Eur. J. Inorg. Chem. **2005**, 2139-2146. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.514
PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 9
-
75. AUTORES: Luminita Marilena Toma, Rodrigue Lescouëzec, Danielle Cangussu, Rosa Llusar, José Mata, Sharon Spey, Jim A. Thomas, Francesc Lloret, Miguel Julve
TÍTULO: Design of single cyanide-bridged tetranuclear bimetallic rectangles exhibiting ferromagnetic coupling
REFERENCIA: Inorg. Chem. Commun. **2005**, 8, 382-385. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.826
PAÍS: U. E. CLAVE: A° N° CITAS: 17
-

-
76. AUTORES: Maxim N. Sokolov, Pavel A. Abramov, Artem L. Gushchin, Irina V. Kalinina, Dmitry Y. Naumov, Alerxander V. Virovets, Eugenia V. Presesypkina, , Cristian Vicent, Rosa Llusar, Vladimir P. Fedin.
- TÍTULO: Synthesis and Reactivity of $W_3Te_7^{4+}$ Clusters and Chalcogen Exchange in the M_3Q_7 (M= Mo, W; Q= S, Se, Te) Cluster Family
- REFERENCIA: Inorg. Chem. **2005**, 44, 8116-8124. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.851
- PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 9
-
77. AUTORES: Rosa Llusar, Sonia Triguero, Cristian Vicent, Maxim N. Sokolov, Benoît Domercq, Marc Fourmigué
- TÍTULO: A family of Oxo-Chalcogenide Molybdenum and Tungsten Complexes ($n-Bu_4N$)₂[M₂O₂(μ -Q)₂(dmit)₂] (M = Mo, W, Q = S, Se): New Synthetic Entries, Structure and Gas-Phase Behavior
- REFERENCIA: Inorg. Chem. **2005**, 44, 8937-8946. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.851
- PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 9
-
78. AUTORES: Marta Feliz, Eva Guillamón, Rosa Llusar, Salah-Eddine Stiriba, Julia Pérez-Prieto, Mario Barberis
- TÍTULO: Unprecedented Stereoselective Synthesis of Catalytically Active Chiral Mo₃CuS₄ Clusters
- REFERENCIA: Chem. Eur. J. **2006**, 1486-1492. ÍNDICE DE IMPACTO: 5.015
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 29
-
79. AUTORES: Andrés G. Algarra, Manuel G. Basallote, Marta Feliz, M. Jesús Fernández-Trujillo, Rosa Llusar, Vicent S. Safont
- TÍTULO: New insights into the mechanism of proton transfer to hydride complexes: kinetic and theoretical evidence showing the existence of competitive pathways for the protonation of the [W₃S₄H₃(dmpe)₃]⁺ cluster with acids
- REFERENCIA: Chem. Eur. J. **2006**, 12, 1413-1426. ÍNDICE DE IMPACTO: 5.015
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 20
-
80. AUTORES: Rosa Llusar, Cristian Vicent
- TÍTULO: Trinuclear Molybdenum and Tungsten Cluster Chalcogenides: From Solid State to Molecular Materials
- REFERENCIA: Inorg. Chem. In Focus III (capítulo 7), ed. G. Meyer, D. Naumann, L. Wesermann, **2006** Wiley-VCH, Weinheim (Alemania). ISBN:3-527-31510-1
- PAÍS: U. E. CLAVE: CL
-
81. AUTORES: Eva Guillamón, Rosa Llusar, Óscar Pozo, Cristian Vicent
- TÍTULO: Ion chemistry of a series of cluster compounds with Mo₃Q₄ and Mo₂M'Q₄ (Q=S, Se; M'= Cu, Co, Ni) cores containing 1,2 diphosphanes as ancillary ligands: New insights on the gas-phase stability from electrospray tandem mass spectrometry
- REFERENCIA: Int. J. Mass Spectrom. **2006**, 254, 28-36. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.337
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 8
-
82. AUTORES: Andrés G. Algarra, Manuel G. Basallote, Marta Feliz, M. Jesús Fernández-Trujillo, Eva Guillamón, Rosa Llusar, Cristian Vicent
- TÍTULO: Synthesis of Novel [W₃PdS₄H₃(dmpe)₃(CO)]⁺ Cubane Cluster and Kinetic Studies on the Substitution of Coordinated Hydrides in Acid Media
- REFERENCIA: Inorg. Chem. **2006**, 45, 5576-5584. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.911
- PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 10
-

-
83. AUTORES: Andrés G. Algarra, Manuel G. Basallote, M. Jesús Fernández-Trujillo, Rosa Llusar, Vicent S. Safont, Cristian Vicent
- TÍTULO: The structure of $[\text{W}_3\text{Q}_4\text{X}_3(\text{dmpe})_3]^+$, Y^- ion pairs (Q= S, Se; X= H, OH, Br; Y= BF_4 , PF_6 , $\text{dmpe} = \text{Me}_2\text{PCH}_2\text{CH}_2\text{PMe}_2$) in dichloromethane solution and the effect of ion-pairing on the kinetics of proton transfer to the hydride cluster $[\text{W}_3\text{S}_4\text{H}_3(\text{dmpe})_3]^+$
- REFERENCIA: Inorg. Chem. **2006**, 45, 5774-5784. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.911
- PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 14
-
84. AUTORES: Andrés G. Algarra, Manuel G. Basallote, C. Esther Castillo, Carolina Corao, M. Jesús Fernández-Trujillo, Rosa Llusar, Cristian Vicent
- TÍTULO: A Combined Stopped-Flow, Electrospray Ionization Mass Spectrometry and ^{31}P NMR Study on the Acetic Acid-Mediated Fragmentation of the Hydroxo-Chalcogenide Cluster $[\text{W}_3\text{Se}_4(\text{OH})_3(\text{dmpe})_3]^+$ to yield the dinuclear $[\text{W}_2\text{Se}_2(\mu\text{-Se})_2(\mu\text{-CH}_3\text{CO}_2)(\text{dmpe})_2]^+$ complex.
- REFERENCIA: Dalton Trans. **2006**, 5725-5733. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.012
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 9
-
85. AUTORES: C. Réthore, I. Suisse, F. Agbossou-Niedercorn, E. Guillamón, R. Llusar, M. Fourmigué, N. Avarvari.
- TÍTULO: Chiral tetrathiafulvane based phosphine- and thiomethyl-oxazoline ligands. Evaluation in palladium catalysed asymmetric allylic alkylation.
- REFERENCIA: Tetrahedron, **2006**, 11942-11947. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.817
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 13
-
86. AUTORES: Rita Hernández-Molina, Irina Kalinina, Maxim Sokolov, María Clausen, Javier Gonzalez Platas, Cristian Vicent, Rosa Llusar.
- TÍTULO: Synthesis, structure and reactivity of cuboidal-type cluster aquo complexes with $\text{W}_3\text{PdS}_4^{4+}$ core
- REFERENCIA: Dalton Trans. **2007**, 550-557. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.212
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 4
-
87. AUTORES: Juan Andrés, Marta Feliz, Jordi Fraxedas, Victor Hernández, Teodomiro López-Navarrete, Rosa Llusar, Guillaume Sauthier, Fabricio Sensato, Bernard Silvi, Carles Bo, Josep M. Campanera
- TÍTULO: Combined Theoretical and Experimental Analysis of the Bonding in the Heterobimetallic Cubane-type $\text{Mo}_3\text{S}_4\text{Ni}$ and $\text{Mo}_3\text{S}_4\text{Cu}$ Core Clusters
- REFERENCIA: Inorg. Chem **2007**, 46, 2159-2166. ÍNDICE DE IMPACTO: 4.123
- PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 4
-
88. AUTORES: Luminita Marilena Toma, Rodrigue Lescouëzec, Santiago Uriel, Rosa Llusar, Catalina Ruiz-Pérez, Jaqueline Vaissermann, Frances Lloret, Miguel Julve
- TÍTULO: 4,2-Ribon Like Ferromagnetic Cyano-Bridged $\text{Fe}^{\text{III}}_2\text{Ni}^{\text{II}}$ Chains: A Magneto-Structural Study
- REFERENCIA: Dalton Trans. **2007**, 3690-3698. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.212
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 20
-

-
89. AUTORES: Antonio Alberola, Rosa Llusar, Sonia Triguero, Cristian Vicent, Maxim N. Sokolov, Carlos J. Gómez-García
- TÍTULO: Structural diversity in charge transfer salts based on Mo₃S₇ and Mo₃S₄Se₃ cluster complexes and bis(ethyleneedithio)tetrathiofulvalene (ET)
- REFERENCIA: J. Mat. Chem. **2007**, 17, 3440-3450. ÍNDICE DE IMPACTO: 4.339
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 10
-
90. AUTORES: Tatiana Mitkina, Vladimir Fedin, Rosa Llusar, Ivan Sorribes, Cristian Vicent
- TÍTULO: Distinctive unimolecular gas-phase reactivity of [M(en)₂]²⁺ (M = Ni, Cu) dications and their inclusion complexes with the macrocyclic cavitand cucurbit[8]uril
- REFERENCIA: J. Am. Mass Spec. **2007**, 18, 1863-1872. ÍNDICE DE IMPACTO: 3.664
- PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 8
-
91. AUTORES: Richard Frantz, Eva Guillamón, Jérôme Lacour, Rosa Llusar, Victor Polo, Cristian Vicent
- TÍTULO: C₃-Symmetric Trinuclear Molybdenum Cluster Sulfides: Configurational Stability, Supramolecular Stereocontrol and Absolute Configuration Assignment
- REFERENCIA: Inorg. Chem. **2007**, 46, 10717-10723 ÍNDICE DE IMPACTO: 4.123
- PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 8
-
92. AUTORES: Andrés Algarra, Manuel G. Basallote, María Jesús Fernández-Trujillo, Eva Guillamón, Rosa Llusar, M. Dolores Segarra, Cristian Vicent
- TÍTULO: Synthesis, Crystal Structure, Aqueous Speciation and Kinetics of Substitution Reactions in a Water-Soluble Mo₃S₄ Cluster Bearing Hydroxymethyl Diphosphine Ligands
- REFERENCIA: Inorg. Chem. **2007**, 46, 7668-7677. ÍNDICE DE IMPACTO: 4.123
- PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 8
-
93. AUTORES: Rita Hernández-Molina, Irina V. Kalinina, Maxim N. Sokolov, Rosa Llusar, Gabriel Peris.
- TÍTULO: Studies on Iron-Containing Chalcogenide Clusters with Core M₃FeQ₄ (M =Mo, W; Q =S, Se)
- REFERENCIA: Synt. and React. in Inorg. Metal-Org. and Nano-Metal Chem. **2007**, 37, 765-770. ÍNDICE DE IMPACTO: 0.784
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 6
-
94. AUTORES: Grettel Valle-Bourrouet, Leslie W. Pineda, Larry R. Falvello, Rosa Llusar, Rhomas Weyhermueller.
- TÍTULO: Synthesis, structure and spectroscopic characterization of Ni(II), Co(II), Cu(II) and Zn(II) complexes with saccharinate and pyrazole
- REFERENCIA: Polyhedron. **2007**, 26, 4470-4478. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.756
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 1
-
95. AUTORES: Olga Gerasko, Ekaterona A. Mainicheva, Marina I. Naumova, Olga P. Yurjeva,
- TÍTULO: Cristian Vicent, Antonio Alberola, Rosa Llusar y Vladimir P. Fedin
Tetranuclear lanthanide aqua hydroxo complexes with macrocyclic ligand cucurbit[6]uril:two structural types of core
- REFERENCIA: Eur. J. Inorg. Chem **2008**, 416-424 . ÍNDICE DE IMPACTO: 2.694
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 36
-

-
96. AUTORES: Rita Hernández-Molina, Irina V. Kalinina, Pavel A. Abramov, Maximn. Sokolov, Alexander V. Virovets, Javier G. Platas, Rosa Llusar, Victor Polo, Cristian Vicent y Vladimir P. Fedin
- TÍTULO: Heterometallic cuboidal clusters $M_3M'Q_4$ (M=Mo, W; M'=Sn, Pb, As, Sb; Q=S, Se): from coordination compounds to supramolecular adducts
- REFERENCIA: Inorg. Chem. **2008**, 47, 306-314. ÍNDICE DE IMPACTO: 4.147
- PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 6
-
97. AUTORES: Antonio Alberola, Rosa Llusar, Cristian Vicent, Juan Andrés, Victor Polo, Carlos J. Gómez-García
- TÍTULO: Synthesis, Molecular and Electronic Structures of a Series of Mo_3CoSe_4 Cluster Complexes with Three Different Metal Electron Populations
- REFERENCIA: Inorg. Chem. **2008**, 47, 3661-3668. ÍNDICE DE IMPACTO: 4.147
- PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 5
-
98. AUTORES: Eva Guillamón, Rosa Llusar, Julia Pérez-Prieto y Salah-Eddine Stiriba
- TÍTULO: Insight into the mechanism of diazocompounds transformation catalyzed by hetero cuboidal clusters $[Mo_3CuQ_4(MeBPE)_3X_4]^+$ (Q=S, Se; X= Cl, Br) : the catalytically active species
- REFERENCIA: J. Organomet. Chem. **2008**, 693, 1723-1727. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.866
- PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 6
-
99. AUTORES: Sonia Triguero, Rosa Llusar, Victor Polo y Marc Fourmigué
- TÍTULO: Halogen Bonding Interactions of sym-Triiodo-Trifluorobenzene with Halide Anions: a Combined Structural and Theoretical Study
- REFERENCIA: Cryst. Growth & Des. **2008**, 7, 2241-2247. ÍNDICE DE IMPACTO: 4.215
- PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 15
-
100. AUTORES: Antonio Alberola, Marc Fourmigué, Carlos J. Gómez-García, Rosa Llusar, and Sonia Triguero
- TÍTULO: Halogen bonding interactions with the $[Mo_3S_7Cl_6]^{2-}$ cluster anion in the mixed valence salt $[EDT-TTFI_2]_4[Mo_3S_7Cl_6] \cdot CH_3CN$
- REFERENCIA: New J. Chem. **2008**, 32, 1103-1109. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.942
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 6
-
101. AUTORES: Rosa Llusar, Sonia Triguero, Victor Polo, Cristian Vicent, Carlos J. Gómez-García, Oliver Jeannin and Marc Fourmigué.
- TÍTULO: Trinuclear Mo_3S_7 Clusters Coordinationated to Dithiolate or Diselenolate Ligands and Their Use in the Preparation of Magnetic Single Component Molecular Conductors.
- REFERENCIA: Inorg. Chem. **2008**, 47, 9400-9409. ÍNDICE DE IMPACTO: 4.147
- PAÍS: EE.UU. CLAVE: A N° CITAS: 12
-
102. AUTORES: Cristian Vicent, Marta Feliz and Rosa Llusar
- TÍTULO: Intrinsic Gas-Phase Reactivity Towards Methanol of Trinuclear Tungsten W_3S_4 Complexes Bearing W-X (X = Br, OH) Groups.
- REFERENCIA: J. Phys. Chem. A **2008**, 112, 12550-12558. ÍNDICE DE IMPACTO: 2.871
- PAÍS: EE.UU. CLAVE: A N° CITAS: 7
-

-
103. AUTORES: Davi S. B. Brasil, Cláudio N. Alves, Giselle M. S. P. Guilhon, Adolfo H. Muller, Ricardo de S. Secco, Gabriel Peris, Rosa Llusar
- TÍTULO: Crystal structure and Theoretical Study of IR and ¹H and ¹³C NMR Spectra of Cordatin , a Natural Product with Antiulcerogenic Activity.
- REFERENCIA: Int. J. Quantum Chem. **2008**, 108, 2564-2575. ÍNDICE DE IMPACTO: 1.317
- PAÍS: EE. UU. CLAVE: A N° CITAS: 7
-
104. AUTORES: Cristian Vicent, Iván Sorribes and Rosa Llusar
- TÍTULO: Electrospray Ionization Based Methods for the Generation of Polynuclear Oxo- and Hydroxo Group 6 Anions in the Gas-Phase.
- REFERENCIA: J. Clust. Sci. **2009**, 20, 177-192. ÍNDICE DE IMPACTO: 0.976
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 6
-
105. AUTORES: Sonja Tragl, Markus Ströbele, Jochen Glaser, Cristian Vicent, Rosa Llusar, H. Jürgen Meyer
- TÍTULO: Compounds with the Electron-Rich [W₆Cl₁₈]²⁻ Cluster Anion.
- REFERENCIA: Inorg. Chem. **2009**, 48, 3825-3831. ÍNDICE DE IMPACTO: 4.657
- PAÍS: EE.UU. CLAVE: A N° CITAS: 5
-
106. AUTORES: Andrés G. Algarra, Manuel G. Basallote, Marta Feliz, M. Jesús Fernández-Trujillo, Rosa Llusar, Vicent S. Safont, Cristian Vicent
- TÍTULO: Unprecedented solvent assisted reactivity of hydrido W₃CuS₄ cubane clusters: the non-innocent behaviour of the cluster-core unit.
- REFERENCIA: Chem. Eur. J. **2009**, 15, 4582-4594. ÍNDICE DE IMPACTO: 5.382
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 5
-
107. AUTORES: Larry R. Falvello, Rosa Llusar, Sonia Triguero, Cristian Vicent
- TÍTULO: A Three Dimensional Adamantane-like Nanoscopic Cage Built from Four Iodide-Bridged Triangular Mo₃S₇ Cluster Units
- REFERENCIA: Chem. Commun. **2009**, 3440-3442. ÍNDICE DE IMPACTO: 5.504
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 1
-
108. AUTORES: Ivan Sorribes, Rosa Llusar, Cristian Vicent
- TÍTULO: Mixed-Metal Assemblies Based on Cyanide Bridged Cubane-type Mo₃CuS₄ / Mo₃S₄ Cluster and Molybdenum Carbonyls
- REFERENCIA: Inorg. Chem. **2009**, 48, 4837-4846. ÍNDICE DE IMPACTO: 4.657
- PAÍS: EE.UU. CLAVE: A N° CITAS: 5
-
109. AUTORES: Pascal Cauliez, Victor Polo, Thierry Roisnel, Rosa Llusar, Marc Fourmigué
- TÍTULO: The thiocyanate anion as a polydentate halogen bond acceptor
- REFERENCIA: Cryst Eng. Commun. **2010**, 12, 558-566. ÍNDICE DE IMPACTO: 4.006
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 8
-
110. AUTORES: Andrés G. Algarra, Manuel G. Basallote, Marta Feliz, M. Jesús Fernández-Trujillo, Rosa Llusar, Vicent S. Safont
- TÍTULO: The role of solvent on the mechanism of proton transfer to hydride complexes: the case of W₃PdS₄H₃(dmpe)₃(CO)⁺ cubane cluster
- REFERENCIA: Chem. Eur. J. **2010**, 16, 1613-1623. ÍNDICE DE IMPACTO: 5.476
- PAÍS: U. E. CLAVE: A N° CITAS: 4
-

111. AUTORES:	Kaplan Kiracki, <u>Rosa Llusar</u> , Victor Polo, Iván Sorribes, <u>Cristian Vicent</u> , <u>Narcis Avarvari</u>		
TÍTULO:	Hybrid Organic / Inorganic Complexes Based on Electroactive TTF-Functionalized Diphosphanes Tethered to C ₃ -Symmetrized Mo ₃ Q ₄ (Q = S, Se) Clusters		
REFERENCIA:	<u>Inorg. Chem.</u> 2010 , <u>49</u> , 1894-1904	ÍNDICE DE IMPACTO:	4.326
PAÍS:	EE.UU.	CLAVE:	A N° CITAS: 3
112. AUTORES:	<u>Rosa Llusar</u> , <u>Cristian Vicent</u>		
TÍTULO:	Trinuclear Molybdenum Cluster Sulfides Coordinated to Dithiolene Ligands and Their Use in the Development of Molecular Conductors		
REFERENCIA:	<u>Coord. Chem. Rev.</u> 2010 , <u>254</u> , 1534-1548	ÍNDICE DE IMPACTO:	10.018
PAÍS:	U. E.	CLAVE:	A N° CITAS: 4
113. AUTORES:	Andrés G. Algarra, <u>Manuel G. Basallote</u> , M. J. Fernandez-Trujillo, <u>Rosa Llusar</u> , Jose A. Pino-Chamorro, Ivan Sorribes and <u>Cristian Vicent</u>		
TÍTULO:	Site Specific Ligand Substitution in Cubane-type Mo ₃ FeS ₄ ⁴⁺ Clusters Bearing diphosphane Ligands: Kinetics and Mechanism of Reaction and Isolation of Mixed Ligand Cl/SPh Complexes		
REFERENCIA:	<u>Dalton Trans.</u> 2010 , <u>39</u> , 3725-3735	ÍNDICE DE IMPACTO:	3.647
PAÍS:	U. E. .	CLAVE:	A N° CITAS: 3
114. AUTORES:	Andrés G. Algarra, <u>Manuel G. Basallote</u> , M. J. Fernandez-Trujillo, Marta Feliz, Eva Guillamon, <u>Rosa Llusar</u> , Ivan Sorribes and <u>Cristian Vicent</u>		
TÍTULO:	Chiral [Mo ₃ S ₄ H ₃ (diphosphine) ₃] ⁺ Hydrido Clusters and Study of the Effect of the Metal Atom on the Kinetics of Proton Transfer to the Coordinated Hydride: Mo vs W		
REFERENCIA:	<u>Inorg. Chem.</u> 2010 , <u>49</u> , 5935-5942	ÍNDICE DE IMPACTO:	4.326
PAÍS:	EE.UU.	CLAVE:	A N° CITAS: 4
115. AUTORES:	Sebastian Krackl, Antonio Alberola, <u>Rosa Llusar</u> , <u>Gerd Meyer</u> and Cristian Vicent		
TÍTULO:	Use of a Cubane-Type Mo ₃ CoS ₄ Molecular Cluster as Paramagnetic Unit in the Synthesis of Hybrid Charge-Transfer Salts		
REFERENCIA:	<u>Inorg. Chim. Acta.</u> 2010 , <u>363</u> , 4197-4201	ÍNDICE DE IMPACTO:	1.899
PAÍS:	U. E. .	CLAVE:	A N° CITAS: -
116. AUTORES:	Rosa Llusar, <u>Victor Polo</u> , Ederley Velez and <u>Cristian Vicent</u>		
TÍTULO:	Sulfur-Based Redox Reactions in Mo ₃ S ₇ and Mo ₃ S ₄ Clusters Bearing Halide and 1,2-dithiolene Ligands: A Mass Spectrometric and DFT Study		
REFERENCIA:	<u>Inorg. Chem.</u> 2010 , <u>49</u> , 8045-8055	ÍNDICE DE IMPACTO:	4.326
PAÍS:	EE.UU.	CLAVE:	A N° CITAS: 1
117. AUTORES:	Pavel A. Petrov, Alexander V. Virovets, Antonio Alberola, <u>Rosa Llusar</u> , Sergey N. Konchenko		
TÍTULO:	Unexpected Transformation of a diamagnetic Mo ₃ (μ ₃ -S)(μ-S) ₃ to a Paramagnetic Mo ₃ (μ ₃ -S) ₂ (μ-S) ₃ Cluster Core by Reaction of [Mo ₃ S ₄ (dppe) ₃ Br ₃](PF ₆) with ¹ BuSNa		
REFERENCIA:	<u>Dalton Trans.</u> 2010 , <u>39</u> , 8875-8877	ÍNDICE DE IMPACTO:	3.647
PAÍS:	U. E. .	CLAVE:	A N° CITAS: 1

118. AUTORES:	<u>Davi S. B. Brazil</u> , Adolfo H. Mueller, Gisele M. S. P. Guilhon, Claudio N. Alves, Gabriel Peris, Rosa Llusar and Vicente Moliner		
TÍTULO:	Isolation, X-ray Crystal Structure and Theoretical Calculations of the New Compound 8-epicordatin and Identification of Others Terpenes and Steroids from the Bark and Leaves of Croton palanostigma Klotzsch		
REFERENCIA:	<u>J. Brazil. Chem. Soc.</u> 2010 , <u>21</u> , 731-739	ÍNDICE DE IMPACTO:	1.444
PAÍS:	Brazil	CLAVE:	A N° CITAS: 3
119. AUTORES:	Tomás F. Beltrán, Marta Feliz, <u>Rosa Llusar</u> , Jose A. Mata, Vicent S. Safont.		
TÍTULO:	Mechanism of the Catalytic Hydrodefluorination of Pentafluoropyridine by Group 6 Triangular Cluster Hydrides Containing Phosphines: A Combined Experimental and Theoretical Study		
REFERENCIA:	<u>Organometallics</u> 2011 , <u>30</u> , 290-297.	ÍNDICE DE IMPACTO:	3.963
PAÍS:	EE. UU.	CLAVE:	A N° CITAS: 5
120. AUTORES:	<u>Rita Hernández-Molina</u> , Javier Gonzalez-Platas, Konstantin A. Kovalenko, Maxim N. Sokolov, Alexandre V. Virovets, Rosa Llusar , <u>Cristian Vicent</u>		
TÍTULO:	Cuboidal Mo ₃ S ₄ and Mo ₃ NiS ₄ Complexes Bearing Dithiophosphates and Chiral Carboxylate Ligands: Synthesis, Crystall Structure and Fluxionality		
REFERENCIA:	<u>Eur. J. Inorg. Chem.</u> 2011 , <u>5</u> , 683-693.	ÍNDICE DE IMPACTO:	3.049
PAÍS:	U. E.	CLAVE:	A N° CITAS: 1
121. AUTORES:	Tomás F. Beltrán, Marta Feliz, Rosa Llusar, Vicent S. Safont, Cristian Vicent		
TÍTULO:	Mechanism of the catalytic gas-phase aldehyde production from trinuclear W ₃ S ₄ complexes bearing W-OEt groups.		
REFERENCIA:	<u>Catal. Today.</u> 2011 , <u>177</u> , 72-78.	ÍNDICE DE IMPACTO:	3.407
PAÍS:	U.E.	CLAVE:	A N° CITAS: 1
122. AUTORES:	Gerrit Wienhoefer, Ivan Sorribes, Albert Boddien, Felix Westerhaus, Kathrin Junge, Henrik Junge, Rosa Llusar, Matthias Beller		
TÍTULO:	General and Selective Iron-Catalyzed Transfer Hydrogenation of Nitroarenes without Base		
REFERENCIA:	<u>J. Am. Chem. Soc.</u> 2011 , <u>133</u> , 12875-12879.	ÍNDICE DE IMPACTO:	9.907
PAÍS:	E.E.U.U.	CLAVE:	A N° CITAS: 14
123. AUTORES:	Karla Calfumán, Maria Jesús Aguirre, Paulina Cañete-Rosales, Soledad Bollo, Rosa Llusar, Mauricio Isaacs.		
TÍTULO:	Electrocatalytic reduction of nitrite on tetra-ruthenated metalloporphyrins/Nafion glassy carbon modified electrode		
REFERENCIA:	<u>Electrochimica Acta</u> 2011 , <u>56</u> , 8484-8491.	ÍNDICE DE IMPACTO:	3.832
PAÍS:	U.E.	CLAVE:	A N° CITAS: -
124. AUTORES:	Adela I. Carrillo, Javier García-Martínez, Rosa Llusar, Elena Serrano, Ivan Sorribes, Cristian Vicent, J. Alejandro Vidal-Moya		
TÍTULO:	Incorporation of Cubane-Type Mo ₃ S ₄ Molybdenum Cluster Sulfides in the Framework of Mesoporous Silica		
REFERENCIA:	<u>Micropor. Mesopor. Mat.</u> 2012 , <u>151</u> , 380-389.	ÍNDICE DE IMPACTO:	3.285
PAÍS:	U.E.	CLAVE:	A N° CITAS: -

125. AUTORES:	Artem Gushchin, Rosa Llusar, David Recatalá, Pavel Abramov		
TÍTULO:	First Heteroleptic Mo ₃ S ₇ Clusters containing Non-innocent Phenanthroline Ligands.		
REFERENCIA:	<u>Russ. J. Inorg. Chem.</u> , 2012 , <u>38</u> , 185-189.		
PAÍS:	U.E.	CLAVE: A	ÍNDICE DE IMPACTO: 0.467 Nº CITAS: -
126. AUTORES:	Pavel A. Petrov, Alexander V. Virovets, Artem S. Bogomyakov, Rosa Llusar, Sergey N. Konchenko, Carlos Gómez-García, Víctor Polo		
TÍTULO:	Synthesis, molecular and electronic structure of an incomplete cuboidal Re ₃ S ₄ cluster with an unusual quadruplet group state.		
REFERENCIA:	<u>Chem. Commun.</u> , 2012 , <u>48</u> , 2713-2715.		
PAÍS:	U.E.	CLAVE: A	ÍNDICE DE IMPACTO: 6.169 Nº CITAS: -
127. AUTORES:	Manuel G. Basallote, M. Jesús Fernández-Trujillo, José Angel Pino-Chamorro, Tomás F. Beltrán, Carolina Corao, Rosa Llusar, Maxim Sokolov, Cristian Vicent		
TÍTULO:	Water-Soluble Mo ₃ S ₄ Clusters Bearing Hydroxypropyl Diphosphine Ligands: Synthesis, Crystal Structure, Aqueous Speciation, and Kinetics of Substitutions Reactions.		
REFERENCIA:	<u>Inorg. Chem.</u> , 2012 , <u>51</u> , 6794-6802.		
PAÍS:	U.E.	CLAVE: A	ÍNDICE DE IMPACTO: 4.601 Nº CITAS: -
128. AUTORES:	Iván Sorribes, Gerrit Wienhöfer, Cristian Vicent, Kathrin Junge, Rosa Llusar, Matthias Beller		
TÍTULO:	Chemoselective Transfer Hydrogenation to Nitroarenes Mediated by Cubane-Type Mo ₃ S ₄ Cluster Catalysis.		
REFERENCIA:	<u>Angew. Chem. Int. Engl. Ed.</u> , 2012 , <u>51</u> , 7794-7798.		
PAÍS:	U.E.	CLAVE: A	ÍNDICE DE IMPACTO: 13.455 Nº CITAS: -
129. AUTORES:	Pavel A. Petrov, Dmitry Yu. Naumov, Rosa Llusar, Carlos J. Gómez-García, Víctor Polo and Sergey N. Konchenko.		
TÍTULO:	Synthesis and structure of a paramagnetic Mo ₃ S ₄ incomplete cuboidal cluster with seven cluster skeletal electrons.		
REFERENCIA:	<u>Dalton Trans.</u> , 2012 , <u>41</u> , 14031-14034		
PAÍS:	U.E.	CLAVE: A	ÍNDICE DE IMPACTO: 3.838 Nº CITAS: -
130. AUTORES:	Iván Sorribes, Francesc Lloret, Joao C. Waerenborg, Víctor Polo, Rosa Llusar, Cristian Vicent.		
TÍTULO:	Cubane-type Mo ₃ FeS ₄ ^{4+,5+} Complexes Coordinated to Diphosphane Ligands: Electron Transfer Series and Electronic Structure		
REFERENCIA:	<u>Inorg. Chem.</u> , 2012 , <u>51</u> , 10512-10521.		
PAÍS:	U.E.	CLAVE: A	ÍNDICE DE IMPACTO: 4.601 Nº CITAS: -

131. AUTORES:	Maxim N. Sokolov, Sergey A. Adonin, Alexander V. Virovets, Pavel Abramov, Cristian Vicent, Rosa Llusar; Vladimir P. Fedin		
TÍTULO:	Complexes of $M_3S_4^{4+}$ (M = Mo, W) with chiral alpha-hydroxy and aminoacids: Synthesis, structure and solution studies		
REFERENCIA:	<u>Inorganica Chimica Acta</u> 2013 , <u>395</u> , 11-18 ÍNDICE DE IMPACTO: 1,976		
PAÍS:	U.E.		
132. AUTORES:	Iván Sorribes, Rosa Llusar, Cristian Vicent.		
TÍTULO:	Unsymmetrically-substituted $Mo_3S_4^{4+}$ clusters bearing diphosphine ligands.		
REFERENCIA:	<u>Eur. J. Inorg. Chem.</u> 2013 , <u>9</u> , 1418-1426 ÍNDICE DE IMPACTO: 3.049		
PAÍS:	U.E.	CLAVE: A	Nº CITAS: -
133. AUTORES:	Artem L. Gushchin, Rosa Llusar, Cristian Vicent, Pavel A. Abramov, Carlos J. Gómez-García		
TÍTULO:	Mo_3Q_7 (Q=S, Se) Clusters containing Dithiolate/diselenolate Ligands: Synthesis, Structure and Their Use as Precursors of Magnetic Single Component Molecular Precursors		
REFERENCIA:	<u>Eur. J. Inorg. Chem.</u> , 2013 , <u>14</u> , 2615-2622 ÍNDICE DE IMPACTO: 3.049		
PAÍS:	U.E.	CLAVE: A	Nº CITAS: -
134. AUTORES:	David Recatalá, Artem L. Gushchin, Rosa Llusar, F. Galindo, Konstantin A. Brylev, Maxim R. Ryzikov, Noboru Kitamura		
TÍTULO:	Dithiolene Dimetallic Molybdenum (V) Complexes Displaying Intraligand Charge Transfer (ILCT) Emission		
REFERENCIA:	<u>Dalton Trans.</u> , 2013 , <u>42</u> , 12947-12955 ÍNDICE DE IMPACTO: 3.838		
PAÍS:	U.E.	CLAVE: A	Nº CITAS: -
135. AUTORES:	Tomás F. Beltrán, Rosa Llusar, Maxim Sokolov, Manuel G. Basallote, M. Jesús Fernández-Trujillo, Jose Ángel Pino-Chamorro		
TÍTULO:	Influence of the Ligand Alkyl Chain Length on the Solubility, Aqueous Speciation, And Kinetics of Substitution Reactions of Water-Soluble M_3S_4 (M = Mo, W) Clusters Bearing Hydroxyalkyl Diphosphines		
REFERENCIA:	<u>Inorg. Chem.</u> , 2013 , <u>52</u> , 8713-8722. ÍNDICE DE IMPACTO:		
4.601			
PAÍS:	U.E.	CLAVE: A	Nº CITAS: -
136. AUTORES:	Tomás F. Beltrán, M. Feliz, Rosa Llusar, C. Vicent, V. S. Safont		
TÍTULO:	Synthesis, structure, gas phase reactivity and catalytic relevance of trinuclear Mo_3S_4 clusters bearing terminal hydroxo and hydrosulfido groups		
REFERENCIA:	<u>Eur. J. Inorg. Chem.</u> , 2013 , DOI:10.1002/ejic.201300890		
PAÍS:	U.E.	CLAVE: A	ÍNDICE DE IMPACTO: 3.049 Nº CITAS: -

ESTANCIAS EN CENTROS EXTRANJEROS

CLAVE: D=doctorando, P=postdoctoral, I=invitado, C= contratado, O=otras(especificar)

CENTRO: Ames Laboratory (Department of Energy), Iowa State University
LOCALIDAD: Ames (Iowa) PAÍS: EE. UU.
AÑO: 1991-1992 DURACIÓN: 10 meses
TEMA: Fases cluster de haluros de Circonio y Praseodimio en bajos estados de oxidación
CLAVE: P

CENTRO: Laboratory for molecular structure and bonding, Texas A&M University
LOCALIDAD: College Station, Texas PAÍS: EE. UU.
AÑO: 1985-1988 DURACIÓN: 3 años y 6 meses
TEMA: Estudio sintético y estructural de clusters de Molibdeno y Wolframio con Azufre
CLAVE: D

CENTRO: University of Angers -CNRS
LOCALIDAD: Angers PAÍS: Francia
AÑO: Junio de 2004 DURACIÓN: 2 semanas
TEMA: Desarrollo de sulfuros clúster trinucleares de molibdeno
CLAVE: I

CENTRO: University of Angers -CNRS
LOCALIDAD: Angers PAÍS: Francia
AÑO: Abril-Junio de 2005 DURACIÓN: 3 meses
TEMA: Desarrollo de conductores moleculares e imanes basados en calcogenuros clúster de metales de transición coordinados a ligandos electroquímicamente activos.
CLAVE: I

CENTRO: University of Rennes -CNRS
LOCALIDAD: Rennes PAÍS: Francia
AÑO: Julio de 2012 DURACIÓN: 2 semanas
TEMA: Nuevas direcciones en la química de los compuestos clúster
CLAVE: I

CONGRESOS

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Castellón
PAÍS: España
FECHA: Septiembre de 1984.
TEMA: Síntesis y reactividad de especies de Rh(0) y de Rh(-I) generadas por reducción electroquímica de complejos de Rh(I).
AUTORES: Pascual Lahuerta, Julio Latorre, Juan Soto, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACION: Ponencia póster
CONGRESO: XX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química.
LUGAR DE CELEBRACION: Castellón
PAÍS: España
FECHA: Septiembre de 1984.
TEMA: Efecto de la basicidad del ligando fósforo dador L en la reducción de compuestos del tipo $\text{RhCl}(\text{CO})\text{L}_2$: Reactividad de las especies electrogeneradas.
AUTORES: Pascual Lahuerta, Julio Latorre, Juan Soto, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 1^{er} Colloque France-Espagne de Chimie de Coordination.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Tarragona
PAÍS: España
FECHA: Septiembre de 1986
TEMA: Síntesis y Estructura del Compuesto dinuclear de Rodio (II) Ortometalado $\text{Rh}_2(\text{O}_2\text{CCH}_3)_3[(\text{C}_6\text{H}_4)\text{P}(\text{C}_6\text{H}_5)(\text{C}_6\text{F}_4\text{Br})].\text{P}(\text{C}_6\text{H}_5)_2(\text{C}_6\text{F}_4\text{Br})$.
AUTORES: F. Barceló, F. A. Cotton, P. Lahuerta, R. Llusar, M. Sanaú, W. Schwotzer, M. A. Úbeda

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación oral
CONGRESO: National ACS Meeting
LUGAR DE CELEBRACIÓN: New York
PAÍS: EE. UU.
FECHA: Abril de 1986
TEMA: Trinuclear Clusters of Niobium and Tantalum bioxocapped M_3X_{17} complexes and M_3X_{13} aquo ion with the Nb_3O_4 core.
AUTORES: F. Albert Cotton, Michael P. Diebold, Rosa Llusar, Wieslaw J. Roth

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación oral
CONGRESO: National ACS Meeting
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Denver
PAÍS: EE. UU.
FECHA: Abril de 1987
TEMA: New Cluster compounds of early Transition Metals
AUTORES: F. Albert Cotton, M. P. Diebold, Rosa Llusar, W. J. Roth

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 7th Fechem Conference on Organometallic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Toledo
PAÍS: España
FECHA: Septiembre de 1987.
TEMA: Organometallation Reactions at Binuclear Dirhodium Compounds.
AUTORES: F. A. Cotton, F. Barceló, P. Lahuerta, R. Llusar, J. Payá, M. A. Úbeda

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación oral
CONGRESO: Tercer encuentro técnico de productores de Caprolactama
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Castellón
PAÍS: España
FECHA: Mayo de 1991
TEMA: Plan de investigación y desarrollo
AUTORES: R. Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: Third Euro-Ceramics (ECERS)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid
PAÍS: España
FECHA: Septiembre de 1993
TEMA: Theoretical Description of Praseodymium-Doped Zircon: Analysis of the Impurity Centers Pr^{3+} : ZrSiO_4 (Ref: V.1, pp. 279-284)
AUTORES: J. Andrés, J. Badenes, A. Beltrán, J. Carda, R. Llusar, G. Monrós, M. A. Tena

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XXIème Congres des Chimistes Theoriciens d'Expression Latine XXI CHITEL)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Grenoble
PAÍS: Francia.
FECHA: Septiembre de 1993
TEMA: Ab initio Perturbed Ion Calculation on Ni^{2+} : KZnF_3 and Ni^{2+} : KMgF_3 . A Structural Study.
AUTORES: J. Andrés, A. Beltrán, J. A. Igualada, R. Llusar

TIPO DE PARTICIPACION: Ponencia póster
CONGRESO: XXIème Congres des Chimistes Theoriciens d'Expression Latine (XXI CHITEL)
LUGAR DE CELEBRACION: Grenoble
PAÍS: Francia
FECHA: Septiembre de 1993
TEMA: Intercalation Compounds Formation: A Theoretical Study.
AUTORES: J. Andrés, A. Beltrán, J. A. Igualada, R. Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 1995 Sanibel Simposia
LUGAR DE CELEBRACIÓN: St Augustine, Florida
PAÍS: EE. UU.
FECHA: Marzo de 1995
TEMA: Transition Metal Doping into Spinel Structures. An Ab Initio Perturbed Ion Study.
AUTORES: J. A. Igualada, A. Beltrán, R. Llusar, J. Andrés

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: Contemporary Inorganic Chemistry: A Symposium in Honor of F. A. Cotton.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: College Station, Texas
PAÍS: EE. UU.
FECHA: Marzo de 1995
TEMA: Multiple Bonds Between Metal Atoms: Topological Analysis of the Hartree-Fock Localization Function.
AUTORES: R. Llusar, A. Beltrán, J. Andrés, B. Silvi, A. Savin

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XIIth Fechem Conference on Organometallic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Praga
PAÍS: República Checa
FECHA: 13 Agosto-5 Septiembre de 1997.
TEMA: New advances in the search of organometallic NLO chromophores.
AUTORES: E. Peris, J. A. Mata, R. Llusar, S. Houbrechts, A. Persoons

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XVII Reunión del Grupo Especializado de Química Organometálica
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona
PAÍS: España
FECHA: 22-24 de Julio de 1998.
TEMA: Síntesis y caracterización de nuevos compuestos heterobimetálicos derivados de ferroceno con alta respuesta óptica no lineal
AUTORES: J. A. Mata, E. Peris, R. Llusar, S. Uriel, S. Houbrechts, A. Persoons

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XIIIth Fechem Conference on Organometallic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lisboa
PAÍS: Portugal
FECHA: 29 Agosto-3 Septiembre de 1999
TEMA: Synthesis and Study of heterobimetallic NLO chromophores.
AUTORES: E. Peris, J. A. Mata, R. Llusar, I. Asselberghs, A. Persoons

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XIIIth Fechem Conference on Organometallic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lisboa
PAÍS: Portugal
FECHA: 29 Agosto-3 Septiembre de 1999
TEMA: Synthesis and Structure of Anionic Trinuclear Complexes Containing the $[\text{Mo}_3\text{S}(\text{S}_2)_3]^{4-}$ Core. Preparation of the first BEDT-TTF salt with a Mo_3 Cluster
AUTORES: S. Uriel, R. Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XXIII Jornadas Chilenas de Química
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Valdivia
PAÍS: Chile
FECHA: 22 –23 de Noviembre de 1999
TEMA: Hidrazonas homobimetálicas obtenidas a partir de hidracinas organometálicas catiónicas del tipo $[(\eta^5\text{-Cp})\text{Fe}[(\eta^6\text{-RC}_6\text{H}_4\text{NHNH}_2)]^+]$ y ferrocencarboxaldehido, $[(\eta^5\text{-Cp})\text{Fe}[(\eta^5\text{-C}_5\text{H}_4\text{-CHO})]$
AUTORES: C. Manzur, L. Millán, M. Fuentealba, J. R. Hamon, R. Llusar, J. A. Mata y D. Carrillo

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: Contemporary Inorganic Chemistry-II
LUGAR DE CELEBRACIÓN: College Station, Texas
PAÍS: EE. UU.
FECHA: Marzo de 2000
TEMA: Synthesis and Structure of Heterobimetallic $[\text{M}_3\text{S}_4\text{Cu}]$ Cuboidal Clusters with $\text{M}=\text{Mo}$ or W
AUTORES: Juan M. Garriga, , Rosa Llusar, Santiago Uriel

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: ESF Seminar on Molecular Magnets
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lübeck
PAÍS: Alemania
FECHA: 20 –23 de mayo de 2000
TEMA: Design of Polynuclear Cyano-containing Metal Complexes: Relevance of the Complex as Ligand Strategy
AUTORES: Rodrigue Lescouëzec, Francesc Lloret, Miguel Julve, Jacqueline Vaissermann, Michel Verdaguer, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: Chemical Bonding: State of the Art in Conceptual Quantum Chemistry.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: La Colle-sur-Loup
PAÍS: France
FECHA: 1–4 de junio de 2000
TEMA: Topological Analysis of Multiple Metal-Metal Bonds in Dimers of the $\text{M}_2(\text{formamidinate})_4$ Type.
AUTORES: R. Llusar, F. Fuster, A. Beltrán, J. Andrés and B. Silvi

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XIX Reunión del Grupo Especializado de Química Organometálica
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Valladolid
PAÍS: España
FECHA: 19 –21 de junio de 2000
TEMA: Síntesis y propiedades de nuevos oligómeros conjugados derivados del ferroceno
AUTORES: J. A. Mata, S. Uriel, R. Llusar, E. Peris

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: Conferencia EURESCO en Química Inorgánica
LUGAR DE CELEBRACIÓN: San Feliu de Guixols
PAÍS: España
FECHA: 2 -7 de septiembre de 2000
TEMA: Synthesis and Study of metal-metal interactions in diferrocene derivatives
AUTORES: J. A. Mata, S. Uriel, R. Llusar, E. Peris

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: Conferencia EURESCO en Química Inorgánica
LUGAR DE CELEBRACIÓN: San Feliu de Guixols
PAÍS: España
FECHA: 2 -7 de septiembre de 2000
TEMA: Synthesis, structure and reactivity of molecular clusters derived from the incomplete cuboidal $[M_3Se_4]$ unit with $M= Mo$ or W .
AUTORES: R. Llusar, S. Uriel , C. Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: Conferencia EURESCO en Química Inorgánica
LUGAR DE CELEBRACIÓN: San Feliu de Guixols
PAÍS: España
FECHA: 2 -7 de septiembre de 2000
TEMA: Synthesis and structure of $[Mo_3S_4Ni]$ cuboidal clusters with $M= Mo$ or W .
AUTORES: M. Feliz, R. Llusar, S. Uriel

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 6th FIGIPS Meeting in Inorganic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona
PAÍS: España
FECHA: 15 -20 de julio de 2001
TEMA: Heterobimetallic cubane-type sulfides and selenides $[M_3Q_4Co]$ ($M=Mo$ o W) clusters: Synthesis, structure and reactivity
AUTORES: R. Llusar, S. Uriel , C. Vicent y Carlos Gomez

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 6th FIGIPS Meeting in Inorganic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona
PAÍS: España
FECHA: 15-20 de julio de 2001
TEMA: Structure, redox and electronic properties of heterobimetallic $[M_3S_4M']$ cuboidal clusters with $M= Mo$ or W , $M'=Cu$ or Ni
AUTORES: M. Feliz, R. Llusar, S. Uriel, S. Berski, B. Silvi, J. Andrés

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: 35th International Conference on Coordination Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Heidelberg
PAÍS: Alemania
FECHA: 21-26 de julio de 2002
TEMA: Cubane-type cluster hydrides with $[W_3CuS_4]$ and $[W_3Se_4]$ units containing phosphines
AUTORES: R. Llusar, M. Feliz, S. Uriel, C. Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 35th International Conference on Coordination Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Heidelberg
PAÍS: Alemania
FECHA: 21-26 de julio de 2002
TEMA: New copper (II) dithiocarbamates and their reactions with nitric oxide
AUTORES: A. Mederos, A. Cachapa, M. Sokolov, R. Hernández-Molina, R. Llusar, M. Feliz, M. T. Armas, J. González-Platas, F. Brito

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: Conferencia EURESCO en Química Inorgánica
LUGAR DE CELEBRACIÓN: San Feliu de Guixols
PAÍS: España
FECHA: 31 de agosto –5 de septiembre de 2002
TEMA: Topological analysis of the bond in cuboidal clusters with [Mo₃M'S₄] (M' = Cu or Ni) units
AUTORES: M. Feliz, R. Llusar, F. Sensato, A. Beltrán, J. Andrés, T. López-Navarrete, V. Hernández

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: VIIIth International Conference on Molecule-Based Magnets
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Valencia
PAÍS: España
FECHA: 5 –10 de Octubre de 2002
TEMA: Synthesis, structure and properties of dmit complexes derived from the [Mo₃S₇] unit
AUTORES: R. Llusar, S. Uriel, C. Vicent, E. Coronado, C. J. Gómez-García

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: VIIIth International Conference on Molecule-Based Magnets
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Valencia
PAÍS: España
FECHA: 5 –10 de Octubre de 2002
TEMA: Organization of Single Molecule Magnets: Synthesis of New M₁₂ Derivatives
AUTORES: A. Forment-Aliaga, E. Coronado, M. Feliz, C. J. Gómez-García, R. Llusar, F. M. Romero

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: FD124 Quantum Inorganic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: York
PAÍS: Gran Bretaña
FECHA: 14 –16 de Abril de 2003
TEMA: Interpretation of the bond in Mo₃CuS₄ and Mo₃NiS₄ cubane type clusters through topological analysis of the electron localization function (ELF) and electron density (AIM)
AUTORES: Juan Andrés, Salwomir Berski, Marta Feliz, Fabricio Sensato, Rosa Llusar and Bernard Silvi

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: FD124 Quantum Inorganic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Universidad de York
PAÍS: Gran Bretaña
FECHA: 14 –16 de Abril de 2003
TEMA: Systematic study of the electronic structure in several fluorine-substituted derivatives of C₂H₆, Si₂H₆, Ge₂H₆ and Sn₂H₆ by topological analysis of the electron localization function (ELF) and electron density (AIM)
AUTORES: Juan Andrés, Rosa Llusar, Slawomir Berski and Bernard Silvi

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada (Session Lecture)
CONGRESO: 7th FIGIPS Meeting in Inorganic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Universidad de Lisboa
PAÍS: Portugal
FECHA: 11 –14 de Junio de 2003
TEMA: New molecular conductors and magnets based on Mo₃S₇ and Mo₃CoS₄ units
AUTORES: Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 7th FIGIPS Meeting in Inorganic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Universidad de Lisboa
PAÍS: Portugal
FECHA: 11 –14 de Junio de 2003
TEMA: Synthesis, structure and redox properties of M₃S₄Pd cuboidal clusters with phosphines
AUTORES: Marta Feliz, Eva Guillamón, Rosa Llusar, Santiago Uriel, Cristian Vicent, María Contel y Mariano Laguna

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 7th FIGIPS Meeting in Inorganic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Universidad de Lisboa
PAÍS: Portugal
FECHA: 11 –14 de Junio de 2003
TEMA: Mechanistical studies on the protonation of phosphino transition metal hydrides containing W₃Q₄ (Q= S, Se)
AUTORES: Manuel G. Basallote, Marta Feliz, M. Jesús Fernández-Trujillo, Rosa Llusar, Vicent S. Safont, Santiago Uriel, y Cristian Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia plenaria
CONGRESO: IXth International Seminar on Inclusion Compounds
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Novosibirsk
PAÍS: Rusia
FECHA: 23–27 de Junio de 2003
TEMA: New molecular conductors and magnets based on Mo₃S₇ and Mo₃Q₄Co cluster units (Q= S, Se)
AUTORES: Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: Reunión científica de Bioinorgánica 2003
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Valencia
PAÍS: España
FECHA: 16–18 de Julio de 2003
TEMA: Mecanismo de reacción del clúster $W_3S_4H_3(dmpe)_3^+$ con ácidos: efecto de las especies atacantes sobre la cinética de protonación de las especies metal-hidruro.
AUTORES: Manuel G. Basallote, Marta Feliz, M. Jesús Fernández-Trujillo, Rosa Llusar, Vicent S. Safont, Santiago Uriel, y Cristian Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: Reunión científica de Bioinorgánica 2003
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Valencia
PAÍS: España
FECHA: 16–18 de Julio de 2003
TEMA: Nuevos ditiocarbamatos diméricos de cobre(II) y sus reacciones con el óxido nítrico
AUTORES: Agostinho Cachapa, Matas Loópez, Rita Hernández-Molina, Maxim Sokolov, Pedro Gili, F. Brito, Marta Feliz, Rosa Llusar y Alfredo Mederos

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: 5th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets (ISCOM'2003)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Port Bourgenay
PAÍS: Francia
FECHA: 21–26 de Septiembre de 2003
TEMA: Single-Component Conductors Based on $[Mo_3S_7]$ Cluster Units with Dithiolate Ligands
AUTORES: Rosa Llusar, Santiago Uriel, Cristian Vicent, Eugenio Coronado, Carlos J. Gómez-García, Enric Canadell, Benoit Braïda

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 21st International Symposium on the Organic Chemistry of Sulfur
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid
PAÍS: España
FECHA: 4–9 de Julio de 2004
TEMA: Synthesis, Structure and Properties of $Mo_3Q_4Q'_{3}$ ($Q, Q' = S, Se$) complexes coordinated to dithiolates
AUTORES: Rosa Llusar, Santiago Uriel, Cristian Vicent, Sonia Triguero, Carlos J. Gómez-García

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: XXXVIth International Conference on Coordination Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Mérida – Yucatán
PAÍS: Méjico
FECHA: 18–23 de Julio de 2004
TEMA: Development of single-component molecular magnetic conductors from trinuclear molybdenum cluster sulfides
AUTORES: Rosa Llusar, Sonia Triguero, Cristian Vicent, Santiago Uriel, Eugenio Coronado, Carlos J. Gómez-García, Enric Canadell, Benoit Braïda

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: XXXVIth International Conference on Coordination Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Mérida – Yucatán
PAÍS: Méjico
FECHA: 18–23 de Julio de 2004
TEMA: Synthesis and reactivity of Ni and Pd heterometallic cuboidal clusters derived from $[M_3Q_4(H_2O)_9]^{4+}$ (M = Mo, W; Q = S, Se): ligand isomerisation and site-differentiated substitution
AUTORES: Rita Hernández-Molina, Maxim N. Sokolov, Irina V. Kalinina, María Clausen, Elena Chubarova, Rosa Llusar, Cristian Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: Conferencia EURESCO en Química Inorgánica
LUGAR DE CELEBRACIÓN: San Feliu de Guixols
PAÍS: España
FECHA: 4–9 de Septiembre de 2004
TEMA: Bonding in cubane-type $[Mo_3M'S_4]$ (M' = Co, Ni, Cu) clusters with different metal electron counts: A combined experimental and theoretical study
AUTORES: Juan Andrés, Marta Feliz, Jordi Fraxedas, Carlos J. Gómez-García, Rosa Llusar, Guillaume Sauthier, Fabricio Sensato, Bernard Silvi and Cristian Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: International Conference on Molecule-based Magnets (ICMM2004)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Tsukuba
PAÍS: Japón
FECHA: 4–8 de Octubre de 2004
TEMA: Single component magnetic conductors based on trinuclear Mo_3S_7 cluster units with outer dithiolates and diselenolates ligands
AUTORES: Rosa Llusar, Sonia Triguero, Santiago Uriel, Cristian Vicent, Juan M. Clemente Juan, Eugenio Coronado, Carlos J. Gómez-García

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: II Reunión Químico-Orgánica del Mediterráneo (REQOMED2)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Almería
PAÍS: España
FECHA: 14-16 de Noviembre de 2004
TEMA: Stereoselective Synthesis of a Mo_3CuS_4 Cluster of Cuboidal Type and Study of its Catalytic Activity in Carbene Transfer Reactions
AUTORES: Julia Pérez-Prieto, Rosa Llusar, Marta Feliz, Salah-Eddine Stiriba, Mario Barberis, Eva Guillamón and Cristian Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: GECOM 2005 CONCOORD
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Autrans-Grenoble
PAÍS: Francia
FECHA: 5-10 de Junio de 2005
TEMA: Trinuclear molybdenum cluster chalcogenides coordinated to dithiolate ligands as molecular blocks for the construction of multifunctional conductors
AUTORES: Rosa Llusar, Sonia Triguero, Cristian Vicent, Olga Gerasko, Artyom Gushchin, Carlos Gómez and Santiago Uriel

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación Oral
CONGRESO: 8th FIGIPS Meeting in Inorganic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Atenas
PAÍS: Grecia
FECHA: 6-9 de Julio de 2005
TEMA: New developments in the chemistry of cubane type molybdenum and tungsten chalcogenides with special emphasis in their catalytic and medial applications
AUTORES: Eva Guillamón, Marta Feliz, Rosa Llusar, M^a Dolores Segarra, Cristian Vicent and Santiago Uriel

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 8th FIGIPS Meeting in Inorganic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Atenas
PAÍS: Grecia
FECHA: 6-9 de Julio de 2005
TEMA: Synthesis, structure and gas-phase behavior of oxo-chalcogenide molybdenum and tungsten complexes
AUTORES: Sonia Triguero, Rosa Llusar, Cristian Vicent and Maxim N. Sokolov

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 8th FIGIPS Meeting in Inorganic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Atenas
PAÍS: Grecia
FECHA: 6-9 de Julio de 2005
TEMA: Diastereoselective synthesis of new chiral phosphino [Mo₃Q₄] and [Mo₃M'Q₄] clusters (Q = S, Se) and their catalytic applications
AUTORES: Eva Guillamón, Rosa Llusar, Cristian Vicent, Salah-Eddine Stiriba and Julia Pérez-Prieto

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: 6th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Ferromagnets (ISCOM'2005)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Key West, Florida
PAÍS: EEUU
FECHA: 11-16 de septiembre de 2005.
TEMA: Development of trinuclear Molybdenum cluster chalcogenides with outer dithiolate ligands as magnetic building blocks for the preparation of molecular conductors
AUTORES: Rosa Llusar, Sonia Triguero, Cristian Vicent, Olga Gerasko, Artyom Gushchin, Carlos Gómez, Santiago Uriel

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: 3rd International Conference of the African Materials Research Society
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Marrakech
PAÍS: Morocco
FECHA: 7-10 de Diciembre de 2005
TEMA: Single Component Molecular Conductors based on Trinuclear Clusters Chalcogenides
AUTORES: Rosa Llusar, Sonia Triguero, Cristian Vicent, Santiago Uriel and Carlos Gómez-García

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: VI Jornada de Millota Educativa i V Jornada d'Harmonització Europea de la Universitat Jaume I
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Castellon
PAÍS: Spain
FECHA: 5-6 de abril de 2006
TEMA: Adaptació al crèdit ECTS de l'assignatura: "Química I(IA04) de Llicenciatura en Químiques"
AUTORES: Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Presentación póster
CONGRESO: VI Jornada de Millora Educativa i V Jornada d'Harmonització Europea de la Universitat Jaume I
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Castellon
PAÍS: Spain
FECHA: 5-6 de abril de 2006
TEMA: Tècniques d'autoaprenentatge en l'assignatura de Química Quàntica
AUTORES: Marta Feliz, Vicent. S. Safont, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: American Crystallographic Association 2006 Annual Meeting
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Honolulu, Hawaii
PAÍS: EE. UU.
FECHA: 22-27 de julio de 2006
TEMA: Subtle Crystal Environmental Influence on Pseudo-Jahn-Teller Effect Expression
AUTORES: Larry R. Falvello, Inmanculada Escorihuela, Rosa M. Llusar, Tatiana Soler, Milagros Tomás

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XXII International Conference on Organometallic Chemistry (ICOMC 2006)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Zaragoza
PAÍS: Spain
FECHA: 23-28 de Julio de 2006
TEMA: Chiral Cubane-Type Molybdenum Cluster Chalcogenides with Diphosphine Ligands and their Applications in Asymmetric Catalysis
AUTORES: Eva Guillamón, Rosa Llusar, Cristian Vicent, Salah-Eddine Stiriba and Julia Pérez-Prieto, Richard Frantz and Jerome Lacour

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XXII International Conference on Organometallic Chemistry (ICOMC 2006)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Zaragoza
PAÍS: Spain
FECHA: 23-28 de Julio de 2006
TEMA: Fine Tuning of the Homo Lumo GAP in neutral Mo₃S₇(dithiolate)₃ Clusters: A combined Experimental and Theoretical Study
AUTORES: Sonia Triguero, Rosa Llusar, Cristian Vicent, Víctor Polo y J. P. Sarasa

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XXII International Conference on Organometallic Chemistry (ICOMC 2006)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Zaragoza
PAÍS: Spain
FECHA: 23-28 de Julio de 2006
TEMA: Trinuclear Mo₃S₄ Cluster Complexes Containing Water Soluble Chelating Diphosphine Ligands: Synthetic and Mechanistic Studies
AUTORES: Eva Guillamón, Rosa Llusar, Cristian Vicent, Andrés G. Algarra, Manuel G. Basallote, M^a Jesús Fernández-Trujillo

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
CONGRESO: 12^a Reunión Científica Plenaria de Química Inorgánica; 6^a Reunión Científica Plenaria de Química del Estado Sólido, (QIES-06)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona
PAÍS: Spain
FECHA: 10-14 de Septiembre de 2006
TEMA: Calcogenuros Clúster Trinucleares de Molibdeno con Perspectivas en Catálisis Asimétrica y Electrónica Molecular
AUTORES: Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: 12^a Reunión Científica Plenaria de Química Inorgánica; 6^a Reunión Científica Plenaria de Química del Estado Sólido, (QIES-06)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona
PAÍS: Spain
FECHA: 10-14 de Septiembre de 2006
TEMA: Influencia del entorno cristalino sobre la expresión del efecto pseudo Jahn-Teller
AUTORES: L. R. Falvello, I. Escorihuela, R. Llusar, T. Soler, M. Tomás

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 12^a Reunión Científica Plenaria de Química Inorgánica; 6^a Reunión Científica Plenaria de Química del Estado Sólido, (QIES-06)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona
PAÍS: Spain
FECHA: 10-14 de Septiembre de 2006
TEMA: Sintonización del GAP Homo Lumo en Clústeres Neutros Mo₃S₇(ditiolato)₃: Estrudio Teórico-Experimental
AUTORES: Sonia Triguero, Víctor Polo, Cristian Vicent, J.P. Sarasa, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 12^a Reunión Científica Plenaria de Química Inorgánica; 6^a Reunión Científica Plenaria de Química del Estado Sólido, (QIES-06)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona
PAÍS: Spain
FECHA: 10-14 de Septiembre de 2006
TEMA: Estudio Sintético y Mecánico de Clústeres Trinucleares Mo₃S₄ Coordinados a Difosfinas Solubles en Agua
AUTORES: Eva M^a Guillamón, Rosa Llusar, Cristian Vicent, Andrés G. Algarra, Manuel G. Basallote, M^a Jesús Fernández-Trujillo

TIPO DE PARTICIPACIÓN:	Moderadora
CONGRESO:	Experiment and Theory in Transition Metal Chemistry (ETTMC)
LUGAR DE CELEBRACIÓN:	Universitat Autònoma de Barcelona (Bellaterra)
PAÍS:	España
FECHA:	27-29 de septiembre de 2006
TIPO DE PARTICIPACIÓN:	Comunicación oral
CONGRESO:	Symposium des Matériaux Moléculaires
LUGAR DE CELEBRACIÓN:	Rennes
PAÍS:	France
FECHA:	19-21 de junio de 2007
TEMA:	Group 6 metal cluster chalcogenides with perspectives in asymmetric catalysis and molecular electronics
AUTORES:	<u>Rosa Llusar</u>
TIPO DE PARTICIPACIÓN:	Comunicación oral
CONGRESO:	9th FIGIPAS Meeting in Inorganic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN:	Viena
PAÍS:	Austria
FECHA:	4-7 de julio de 2007
TEMA:	Cubane-type group 6 metal cluster sulfides containing diphosphine ligands with potential applications in biphasic and asymmetric catalysis
AUTORES:	C. Corao, E. Guillamón, <u>Rosa Llusar</u> , V. Polo, C. Vicent, J. Perez-Prieto, S. Stitiba, R. Frantz, J. Lacour, A. G. Algarra and M. G. Basallote.
TIPO DE PARTICIPACIÓN:	Comunicación oral
CONGRESO:	Internacional Seminar: "New direction in modern coordination chemistry"
LUGAR DE CELEBRACIÓN:	Novosibirsk
PAÍS:	Russia
FECHA:	12-22 de agosto de 2007
TEMA:	Group 6 Transition Metal Cluster Chalcogenides with perspectives in Catalysis and Molecular Electronics
AUTORES:	<u>Rosa Llusar</u>
TIPO DE PARTICIPACIÓN:	Comunicación oral
CONGRESO:	XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
LUGAR DE CELEBRACIÓN:	Toledo
PAÍS:	Spain
FECHA:	9-14 de septiembre de 2007
TEMA:	Nuevas sales de transferencia de carga basadas en clústeres Mo ₃ S ₇ y Mo ₃ S ₄ Se ₃ con el dador orgánico bis(etilenditio)tetratrafalvaleno (ET). Estructura y propiedades.
AUTORES:	A. Alberola, R. Llusar, <u>S. Triguero</u> , C. Vicent, C. Gómez-García

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Toledo
PAÍS: Spain
FECHA: 9-14 de septiembre de 2007
TEMA: Clústeres M_3S_4 ($M = Mo, W$) solubles en medio acuoso mediante coordinación de ligandos hidroxialquildifosfinas.
AUTORES: C. Corao, E. Guillamón, Rl. Llusar, C. Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Toledo
PAÍS: Spain
FECHA: 9-14 de septiembre de 2007
TEMA: Estabilidad configuracional y estereocontrol supramolecular de clústeres $[Mo_3S_4Cl_3(\text{difosfina})_3]^+$ con simetría C_3 .
AUTORES: R. Franz, E. Guillamón, J. Lacour, R. Llusar, V. Polo, I. Sorribes, C. Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: 7th Internacional Syposium on Crystalline Organic Metals Superconductors and Ferromagnets
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Peñíscola
PAÍS: Spain
FECHA: 24-29 de septiembre de 2007
TEMA: Molecular conductors based on trinuclear molybdenum cluster chalcogenides
AUTORES: Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 7th Internacional Syposium on Crystalline Organic Metals Superconductors and Ferromagnets
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Peñíscola
PAÍS: Spain
FECHA: 24-29 de septiembre de 2007
TEMA: Structural diversity in charge transfer salts based on Mo_3S_7 and $Mo_3S_4Se_3$ clusters complexes and bis(ethylendithio)tetrathifulvalene (ET)
AUTORES: Rosa Llusar, Antonio Alberola, Sonia Triguero, Cristian Vicent, Maxim N. Sokolov, Carlos J. Gómez-García

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: 37th Inorganic Reaction Mechanisms Group Meeting (37IRMGGM)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona
PAÍS: Spain
FECHA: 9-12 de enero de 2008
TEMA: Proton transfer mechanisms in W_3Q_4 ($Q = S, Se$) cluster complexes with incomplete cuboidal structures
AUTORES: Andrés G. Algarra, Manuel G. Basallote, Marta Feliz, M. Jesús Fernández Trujillo, Eva Guillamón, Rosa Llusar, Vicent S. Safont, Cristian Vicent.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 37th Inorganic Reaction Mechanisms Group Meeting (37IRMGM)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona
PAÍS: Spain
FECHA: 9-12 de enero de 2008
TEMA: A theoretical study on the reactivity of $[W_3CuS_4H_3Cl(dmpe)_3]^+$ in acetonitrile/water mixtures
AUTORES: Vicent S. Safont, Marta Feliz, Rosa Llusar, Andrés G. Algarra, M. Jesús Fernández Trujillo, Manuel G. Basallote

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 37th Inorganic Reaction Mechanisms Group Meeting (37IRMGM)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona
PAÍS: Spain
FECHA: 9-12 de enero de 2008
TEMA: Mechanistic studies on the protonation of the trinuclear complexes $[M_3S_4[(R,R)\text{-Me-BPE}]_3H_3]Br$ ($M = Mo, W$ and $(R,R)\text{-Me-BPE} = (+)\text{-}1,2\text{-bis-}(2R,5R)\text{-}2,5\text{-}(\text{dimethylphospholan-}1\text{-yl})\text{ethane}$).
AUTORES: Andrés G. Algarra, Manuel G. Basallote, M. Jesús Fernández Trujillo, Eva Guillamón, Rosa Llusar, Cristian Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 37th Inorganic Reaction Mechanisms Group Meeting (37IRMGM)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona
PAÍS: Spain
FECHA: 9-12 de enero de 2008
TEMA: Experimental and computational study of the gas-phase dissociation of Mo_3S_7 clusters bearing 1,2-benzenedithiolate ligands. New insights on the mechanism of ligand-based internal redox processes.
AUTORES: Victor Polo, Cristian Vicent, Sonia Triguero, Rosa Llusar, Juan Andrés.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: IX Escuela Nacional de Materiales Moleculares
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Peñíscola (Castellón)
PAÍS: Spain
FECHA: 17-22 de febrero de 2008
TEMA: Calcogenuros clúster de molibdeno tri- y tetranucleares con ligandos cianuro y su utilización como bloques para la construcción de entidades polinucleares
AUTORES: Iván Sorribes, Cristian Vicent y Rosa Llusar.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: XXI Simposio Iberoamericano de Catálisis (SICAT 2008)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Benalmádena-Costa (Málaga)
PAÍS: Spain
FECHA: 22-27 de junio de 2008
TEMA: Estudio de la actividad catalítica en la reacción de oxidación de ciclohexeno utilizando como precursores catalíticos complejos tipo cubanos del tipo $[M_3S_4]$, donde $M = Mo, W$
AUTORES: Carolina Corao, Lindora D'Ornelas, Rosa Llusar.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
CONGRESO: International Workshop on Transition Metal Cluster
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Rennes
PAÍS: France
FECHA: 3-5 de julio de 2008
TEMA: New insights into the chemistry of transition metal cluster chalcogenides directed to their applications in catalysis and molecular electronics
AUTORES: Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: International Workshop on Transition Metal Cluster
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Rennes
PAÍS: France
FECHA: 3-5 de julio de 2008
TEMA: Gas-Phase ion chemistry of tungsten cluster complexes and their relevance to the catalytic methanol to formaldehyde transformation
AUTORES: Cristian Vicent, Tomás F. Beltrán, Marta Feliz and Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: International Workshop on Transition Metal Cluster
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Rennes
PAÍS: France
FECHA: 3-5 de julio de 2008
TEMA: Synthesis, Molecular and electronic structures of a series of Mo_3CoQ_4 (Q = S, Se) cluster complexes with three different metal electron populations
AUTORES: Antonio Alberola, Rosa Llusar, Cristian Vicent, Juan Andrés, Victor Polo, Carlos J. Gómez-García

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: International Workshop on Transition Metal Cluster
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Rennes
PAÍS: France
FECHA: 3-5 de julio de 2008
TEMA: Unexpected water-catalyzed ligand substitution on hydrido W_3CuS_4 cubane-type clusters. A kinetic and computational mechanistic study
AUTORES: Marta Feliz, Andrés G. Algarra, Manuel G. Basallote, M. Jesús Fernández Trujillo, Rosa Llusar, Vicent S. Safont and Cristian Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: International Workshop on Transition Metal Cluster
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Rennes
PAÍS: France
FECHA: 3-5 de julio de 2008
TEMA: Statistical kinetics in reactions of M_3Q_4 clusters revisited: some examples showing moderate and large deviations from statistical predictions
AUTORES: Manuel G. Basallote, Andrés G. Algarra, M. Jesús Fernández Trujillo, Eva Guillamón, Rosa Llusar, M. Dolores Segarra, Cristian Vicent and Rita Hernandez-Molina.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: International Workshop on Transition Metal Clusters
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Rennes
PAÍS: France
FECHA: 3-5 de julio de 2008
TEMA: Solution behaviour of the novel water-soluble $[\text{Mo}_3\text{S}_4(\text{diphosphine})_3\text{Cl}_3]^+$ cluster
AUTORES: Andrés G. Algarra, Manuel G. Basallote, M. Jesús Fernandez Trujillo, Eva Guillamón, Rosa Llusar, M. Dolores Segarra and Cristian Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: International Workshop on Transition Metal Clusters
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Rennes
PAÍS: France
FECHA: 3-5 de julio de 2008
TEMA: Mechanistic studies on the protonation of the trinuclear hydride complex $[\text{Mo}_3\text{S}_4((\text{R,R})\text{-Me-BPE})_3\text{H}_3]\text{Br}$ ((R,R)-Me-BPE = (+)-1,2-Bis-(2R,5R)-2,5-(Dimethylphospholan-1-yl)ethane)
AUTORES: M. Jesús Fernandez Trujillo, Andrés G. Algarra, Manuel G. Basallote, Eva Guillamón, Rosa Llusar, Cristian Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: International Workshop on Transition Metal Clusters
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Rennes
PAÍS: France
FECHA: 3-5 de julio de 2008
TEMA: Coordination of bidentate diphosphine redox-active ligand to the Mo_3S_4 core: structure and properties
AUTORES: Kaplan Kirakci, Rosa Llusar, Cristian Vicent and N. Avarvari

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: International Workshop on Transition Metal Clusters
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Rennes
PAÍS: France
FECHA: 3-5 de julio de 2008
TEMA: A three dimensional cage complex built from Mo_3S_7 units with an adamantane-like structure
AUTORES: Larry Falvello, Rosa Llusar, Sonia Triguero and Cristian Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: International Workshop on Transition Metal Clusters
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Rennes
PAÍS: France
FECHA: 3-5 de julio de 2008
TEMA: Cubane-type molybdenum chalcogenides coordinated to cyanide ligands as building blocks for the preparation of higher nuclearity aggregates.
AUTORES: Iván Sorribes, Cristian Vicent y Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: 38th International Conference on Coordination Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Jerusalem
PAÍS: Israel
FECHA: 20-25 de julio de 2008
TEMA: Proton transfer mechanisms in W₃S₄ (Q = S, Se) cluster hydrides with incomplete cuboidal structures
AUTORES: A.G. Algarra, M.G. Basallote, M. Feliz, M.J. Fernandez-Trujillo, E. Guillamon, R. Llusar, V.S. Safont, C. Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
CONGRESO: Workshop on molecular materials
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Scavém
PAÍS: Portugal
FECHA: 10 de noviembre de 2008
TEMA: Molecular conductors based on transition metal cluster chalcogenides combined with electroactive species.
AUTORES: A. Alberola, S. Krackl, R. Llusar, S. Triguero, V. Polo, C. Vicent, N. Avarvari, M. Fourmigué.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
CONGRESO: Workshop organizada por el equipo MALTA-Consolider "Viendo el enlace químico sin experimentos"-
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oviedo
PAÍS: España
FECHA: 18 de diciembre de 2008
TEMA: Chemical bond and reactivity in transition metal cluster complexes
AUTORES: R. Llusar,

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: 38th Meeting of the RSC Inorganic Reaction Mechanisms Group (38th IRMGM)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oxford
PAÍS: Reino Unido
FECHA: 4-6 de enero de 2009
TEMA: Unprecedented solvent assisted reactivity of hydrido W₃CuS₄ cubane clusters: the non-innocent behaviour of the cluster-core unit
AUTORES: Marta Feliz, Andrés G. Algarra, Manuel G. Basallote, M. Jesús Fernández-Trujillo, Rosa Llusar, Vicent S. Safont, Cristian Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia Poster
CONGRESO: 38th Meeting of the RSC Inorganic Reaction Mechanisms Group (38th IRMGM)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oxford
PAÍS: Reino Unido
FECHA: 4-6 de enero de 2009
TEMA: Synthesis, reactivity and kinetic studies on the novel [Mo₃FeS₄Cl₄(dmpe)₃] cluster
AUTORES: J.A. Pino-Chamorro, I. Sorribes, Manuel G. Basallote, M. Jesús Fernández-Trujillo, Rosa Llusar and Cristian Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación Oral
CONGRESO: COST D35 Workshop: Dithiolenes and non-innocent redox-active ligands
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Vravrona (Attica)
PAÍS: Grecia
FECHA: 17-19 de Junio de 2009
TEMA: Molecular Conductors Based on Transition Metal Cluster Chalcogenides Combined with Electroactive Species
AUTORES: Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia Póster
CONGRESO: 10th FIGIPAS Meeting in Inorganic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Palermo
PAÍS: Italia
FECHA: 1-4 de Julio de 2009
TEMA: Site-differentiated cubane-type Mo₃FeS₄ chlorine/thiophenolate clusters
AUTORES: Iván Sorribes, Rosa Llusar, Cristian Vicent, Manuel G. Basallote, M. J. Fernández-Trujillo, and J. A. Pino-Chamorro.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia Póster
CONGRESO: 10th FIGIPAS Meeting in Inorganic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Palermo
PAÍS: Italia
FECHA: 1-4 de Julio de 2009
TEMA: New diphosphino M₃S₄ (M = Mo, W) cubane-type clusters containing fluorides and their role in hydrodeflurination reactions
AUTORES: Tomás F. Beltrán, Marta Feliz, Rosa Llusar and Cristian Vicent.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia Póster
CONGRESO: XXXII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oviedo
PAÍS: España
FECHA: 13-18 de septiembre de 2009
TEMA: Clústeres Mo₃FeS₄ con Sustitución Cloro/Tiofenolato Regioselectiva.
AUTORES: I. Sorribes, J. A. Pino-Chamorro, M. G. Basallote, M. J. Fernández-Trujillo, C. Vicent y R. Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia Póster
CONGRESO: XXXII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oviedo
PAÍS: España
FECHA: 13-18 de septiembre de 2009
TEMA: Fluoruros Clúster M₃S₄ (M = Mo, W) con Estructura de Tipo Cubano Coordinados a Ligandos Difosfina y su Papel en Reacciones de Hidrodesulfuración.
AUTORES: Tomás F. Beltrán, Marta Feliz, Cristian Vicent y Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación Oral
CONGRESO: IV Reunión de la Sociedad Española de Espectrometría de Masas
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Castellón
PAÍS: España
FECHA: 30 de septiembre-2 de Octubre de 2009
TEMA: Tandem mass spectrometric techniques for the study of catalytic industrial processes.
AUTORES: Cristian Vicent, Tomás F. Beltrán, Marta Feliz y Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
CONGRESO: XI Escuela Nacional de Materiales Moleculares
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Valladolid
PAÍS: España
FECHA: 14-19 de febrero de 2010
TEMA: Conductores moleculares basados en clústers
AUTORES: Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
CONGRESO: Materiales de interés tecnológico
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Presidente Prudente
PAÍS: Brasil
FECHA: 9-10 de septiembre de 2010
TEMA: Conductores moleculares basados en clústers
AUTORES: Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
CONGRESO: International workshop on transition metal clusters- II
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Rostock
PAÍS: Alemania
FECHA: 30 de septiembre-2 de octubre de 2010
TEMA: Group 6 transition metal cluster chalcogenides: from solid state structures to molecular systems and supramolecular architectures
AUTORES: Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: International workshop on transition metal clusters- II
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Rostock
PAÍS: Alemania
FECHA: 30 de septiembre-2 de octubre de 2010
TEMA: Catalytic hydrodesulfurization of pentafluoropyridine by group six triangular cluster hydrides containing phosphines: a combined experimental and theoretical study
AUTORES: Tomas F. Beltrán, Marta Feliz, Rosa Llusar, Jose A. Mata, Vicent S. Safont

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: International workshop on transition metal clusters- II
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Rostock
PAÍS: Alemania
FECHA: 30 de septiembre-2 de octubre de 2010
TEMA: Incorporation of well-defined cubane type Mo₃S₄ clusters in mesoporous silica
AUTORES: Iván Sorribes, Rosa Llusar, Cristian Vicent, Adela I. Carrillo, E. Serrano, Javier García

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: International workshop on transition metal clusters- II
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Rostock
PAÍS: Alemania
FECHA: 30 de septiembre-2 de octubre de 2010
TEMA: Synthesis and reactivity of new mixed chalcogen triangular cluster complexes of Ta, Mo and W.
AUTORES: Artem Gushchin, Cristian Vicent, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
CONGRESO: Workshop on Perspectives in Kinertico-Mechanistic Studies on Clusters and other Polynuclear Metal Complexes
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Cádiz
PAÍS: España
FECHA: 22-23 de noviembre de 2010
TEMA: Kinetic and Mechanistic Studies of some Metal Cluster Chalcogenide Reactions relevant in Catalysis
AUTORES: Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
CONGRESO: First International Meeting on Multifunctional Magnetic Materials
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Valencia
PAÍS: España
FECHA: 25-26 de noviembre de 2010
TEMA: Molecular Conductors based on Cluster Complexes
AUTORES: Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: Hybrid Materials 2011
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Strasbourg
PAÍS: Francia
FECHA: 6-10 de marzo de 2011
TEMA: Construction of high nuclearity materials from molybdenum cluster sulfides
AUTORES: Rosa Llusar, Tomás F. Beltrán, Iván Sorribes, Sonia Triguero, Cristian Vicent

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: Hybrid Materials 2011
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Strasbourg
PAÍS: Francia
FECHA: 6-10 de marzo de 2011
TEMA: Experimental and Theoretical Study of Catalytic C-F Bond Activation by Group Six Triangular Clusters Containing Phosphines
AUTORES: Tomás F. Beltrán, Marta Feliz , Rosa Llusar , Jose A. Mata , and Vicent S. Safont

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: Hybrid Materials 2011
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Strasbourg
PAÍS: Francia
FECHA: 6-10 de marzo de 2011
TEMA: Cubane-Type Mo₃S₄ and Mo₃Cu₄S₄ clusters covalently embedded in mesoporous organosilica
AUTORES: I. Sorribes, R. Llusar, C. Vicent, A.I. Carrillo, E. Serrano, J. Garcia.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: First EuCheMS Inorganic Chemistry Conference (EICC-1)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Manchester
PAÍS: Reino Unido
FECHA: 11-14 de abril de 2011
TEMA: Synthesis, and Kinetics of Substitution Reactions in a Water-Soluble Mo₃S₄ Cluster Bearing Hydroxypropyl Diphosphine Ligands: the opening and closing of chelate rings with alkoxo groups
AUTORES: J. A. Pino-Chamorro, M. Garcia-Basallote, M. J. Fernández-Trujillo, R. Llusar, C. Vicent, I. Sorribes, T. Beltrán Álvarez.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Flash presentation
CONGRESO: XXXIII Reunión Bienal de la RSEQ
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Valencia
PAÍS: España
FECHA: 25-28 de julio de 2011
TEMA: Estudio Cinético-Mecanístico de la Reacción de Sutilución de Hidruros Terminales en Clústeres Quirales Hidruro de Molibdeno
AUTORES: Eva M^a Guillamón Torres, Andrés G. Algarra, Manuel G. Basallote, M. Jesús Fernández-Trujillo, Marta Feliz, Iván Sorribes, Cristian Vicent, Rosa Llusar.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Flash presentation
CONGRESO: XXXIII Reunión Bienal de la RSEQ
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Valencia
PAÍS: España
FECHA: 25-28 de julio de 2011
TEMA: Comportamiento cinético-mecanístico en disolución acuosa de clústeres M₃Q₄ conteniendo difosfinas sustituidas con grupos hidroxialquilo.
AUTORES: J. A. Pino-Chamorro, M. Garcia-Basallote, M. J. Fernández-Trujillo, R. Llusar, C. Vicent, I. Sorribes, T. Beltrán Álvarez.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid
PAÍS: España
FECHA: 22-30 de agosto de 2011
TEMA: Structure elucidation and aqueous speciation of water-soluble M_3S_4 $M = (Mo, W)$ clusters bearing hydroxypropyl diphosphine ligands
AUTORES: T. F. Beltrán, R. Llusar, M.G. Basallote, M. J. Fernandez-Trujillo, J. A. Pino, C. Corao, M. Sokolov.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XXII Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid
PAÍS: España
FECHA: 22-30 de agosto de 2011
TEMA: Structural characterization of $Mo_3Fe(NO)_S_4$ Cubane-type clusters with different electron populations
AUTORES: I. Sorribes, R. Llusar, C. Vicent, F. Lloret, V. Polo.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: SHELX workshop
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Göttingen
PAÍS: Alemania
FECHA: 5-8 de septiembre de 2011
TEMA: Synthesis, crystal structure and aqueous speciation of water-soluble M_3S_4 ($M = Mo, W$) clusters bearing hydroxypropyl diphosphine ligands.
AUTORES: T. F. Beltrán, R. Llusar, M.G. Basallote, M. J. Fernandez-Trujillo, J. A. Pino, C. Corao, M. Sokolov.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: SHELX workshop
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Göttingen
PAÍS: Alemania
FECHA: 5-8 de septiembre de 2011
TEMA: Synthesis and Structural Characterization of $Mo_3Fe(NO)_S_4$ Cubane-Type Clusters with Different Electron Populations
AUTORES: I. Sorribes, R. Llusar, C. Vicent, F. Lloret, V. Polo.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
CONGRESO: Agilent Technologies X-ray User Group Meeting
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oxford
PAÍS: Reino Unido
FECHA: 8-9 de febrero de 2012
TEMA: Crystal Structures and Aqueous Speciation of Water-Soluble Clusters Bearing Hydroxy Alkyl Diphosphine Ligands
AUTORES: R. Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
CONGRESO: XIII Escuela de Materiales Moleculares
LUGAR DE CELEBRACIÓN: El Escorial
PAÍS: España
FECHA: 5-10 de febrero de 2012
TEMA: Funcionalización de Clústeres Metálicos dirigida a sus Aplicaciones en Catálisis y Electrónica Molecular.
AUTORES: R. Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
CONGRESO: Workshop "New Trends in Material Science"
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Bucarest
PAÍS: Rumania
FECHA: 28-31 de marzo de 2012
TEMA: Functionalization of Cluster Chalcogenides Directed to Their Applications in Catalysis and Molecular Electronics.
AUTORES: R. Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia plenaria
CONGRESO: Cluster-2012
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Akademgorodok, Novosibirsk
PAÍS: Rusia
FECHA: 17-22 de junio de 2012
TEMA: Functionalization of Cluster Chalcogenides Directed to Their Applications in Catalysis and Molecular Electronics.
AUTORES: R. Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: Vth International Conference on Molecular Materials
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona
PAÍS: España
FECHA: 3-6 de julio de 2012
TEMA: Heterometallic molecular materials based in molybdenum cluster units
AUTORES: D. Recatalá, A. Gushchin, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: Vth International Conference on Molecular Materials
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona
PAÍS: España
FECHA: 3-6 de julio de 2012
TEMA: Heterobimetallic Chiral Hydride M₃PsS₄ (M=M=, W) Clusters: Characterization and Optical Properties
AUTORES: E. Guillamón, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 18th International Symposium in Homogeneous Catalysis
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Toulouse
PAÍS: Francia
FECHA: 8-13 de julio de 2012
TEMA: Influence of the Diphosphine Basicity in the Hydrodefluorination of Pyridine
AUTORES: Carmina Alfonso, Tomás F. Beltrán, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: 18th International Symposium in Homogeneous Catalysis
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Toulouse
PAÍS: Francia
FECHA: 8-13 de julio de 2012
TEMA: New Molybdenum and Tungsten M₃S₄ Cubane-Type Clusters Coordinated to Heterodentate Ligands and Their Role in Hydridefluorination Reactions
AUTORES: Tomás F. Beltrán, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Chair (Organizadora)
CONGRESO: IIIrd International Workshop on Transition Metal Clusters (IWTMC-III)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Benicàssim
PAÍS: España
FECHA: 6-9 de septiembre de 2012
AUTORES: Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación Oral
CONGRESO: IIIrd International Workshop on Transition Metal Clusters (IWTMC-III)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Benicàssim
PAÍS: España
FECHA: 6-9 de septiembre de 2012
TEMA: Stereoselective Synthesis and Catalytic Activity of Optically Pure Homo- and Heterobimetallic Group 6 Metal Cuboidal Clusters
AUTORES: E. Guillamón, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación Oral
CONGRESO: IIIrd International Workshop on Transition Metal Clusters (IWTMC-III)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Benicàssim
PAÍS: España
FECHA: 6-9 de septiembre de 2012
TEMA: Chemoselective Transfer Hydrogenation to Nitroarenes Mediated by Cubane-Type Mo₃S₄ Cluster Catalysts
AUTORES: Iván Sorribes, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster + flash presentation

CONGRESO: IIIrd International Workshop on Transition Metal Clusters (IWTMC-III)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Benicàssim
PAÍS: España
FECHA: 6-9 de septiembre de 2012
TEMA: New trinuclear M₃S₄ (M = Mo, W) clusters coordinated to heterodentate P,N ligands and their role in hydrodefluorination reactions
AUTORES: Tomás F. Beltrán, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster + flash presentation
CONGRESO: IIIrd International Workshop on Transition Metal Clusters (IWTMC-III)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Benicàssim
PAÍS: España
FECHA: 6-9 de septiembre de 2012
TEMA: Molybdenum cluster units coordinated to bifunctional dithiolene ligands
AUTORES: David Recatalá, Artem Gushchin, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster + flash presentation
CONGRESO: IIIrd International Workshop on Transition Metal Clusters (IWTMC-III)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Benicàssim
PAÍS: España
FECHA: 6-9 de septiembre de 2012
TEMA: Trinuclear M₃S₄ clusters coordinated to 1,2-(bis)diphenylphosphinoethane and their role in the hydrodefluorination of pentafluoropyridine
AUTORES: Carmina Alfonso, Tomás F. Beltrán, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: National Advisory Committee
CONGRESO: 40th International Conference on Coordination Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Valencia
PAÍS: España
FECHA: 9-13 de septiembre de 2012
AUTORES: Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
CONGRESO: Theoretical Chemistry in Spain told by women. A Symposium in Honour of Rosa Caballol
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Tarragona
PAÍS: España
FECHA: 30 y 31 de enero de 2013
TEMA: Chemical Bonding and Reactivity in Transition Metal Clusters
AUTORES: Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Conferencia invitada
CONGRESO: 1st Workshop on Advanced Materials for Solar Fuels Applications
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Castellón
PAÍS: España
FECHA: 11 de febrero de 2013
TEMA: Molecular Molybdenum cluster sulphides as light-driven hydrogen evolution catalysts
AUTORES: Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XXXIV Reunión Bienal de la Real Sociedad de Española de Química
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santander
PAÍS: España
FECHA: 15-18 de septiembre de 2013
TEMA: "Síntesis y caracterización de clústeres con unidad central M₃S₄ (M = Mo, W) con ligandos híbridos P-N
AUTORES: Carmina Alfonso, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XXXIV Reunión Bienal de la Real Sociedad de Española de Química
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santander
PAÍS: España
FECHA: 15-18 de septiembre de 2013
TEMA: "Síntesis y caracterización de clústeres trinucleares M₃S₄ (M = Mo, W) con ligandos heterodentados. Reactividad frente a ácidos y bases. Actividad catalítica en reacciones de reducción de nitroarenos"
AUTORES: Tomás F. Beltrán, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XXXIV Reunión Bienal de la Real Sociedad de Española de Química
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santander
PAÍS: España
FECHA: 15-18 de septiembre de 2013
TEMA: "Síntesis de clústeres Mo₃CuS₄ quirales y estudio de su actividad catalítica en la ciclopropanación intermolecular del estireno"
AUTORES: Eva M. Guillamón, Marta Blasco, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XXXIV Reunión Bienal de la Real Sociedad de Española de Química
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santander
PAÍS: España
FECHA: 15-18 de septiembre de 2013
TEMA: "Reducción catalítica de nitro- y azoarenos a anilinas utilizando la especie clúster [Mo₃S₄Cl₃(Me₂en)₃]Cl y organosilanos
AUTORES: Elena Pedrajas, Iván Sorribes, Cristian Vicent, Jose A. Mata, Rosa Llusar

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Ponencia póster
CONGRESO: XXXIV Reunión Bienal de la Real Sociedad de Española de Química

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santander
 PAÍS: España
 FECHA: 15-18 de septiembre de 2013
 TEMA: "Visible light-driven reduction of water by a novel heteroleptic Mo₃S₇ cluster bearing a functional bipyridine ligand"
 AUTORES: David Recatalá, Rosa Llusar, A.L. Gushchin, E.A. Kozlova, T.P. Lyubina, Y.A. Laricheva, P.A. Abramov, M. R. Ryzhikov, A. V. Vorontsov, M. N. Sokolov

CONFERENCIAS

TÍTULO: "Electrochemical Studies on Transition Metal Complexes"
 ACTO: Chemistry Department Seminars
 LUGAR DE PRESENTACIÓN: Texas A&M University AÑO: 1985

TÍTULO: "The role of promoters in hydrodesulfurization catalysis"
 ACTO: Chemistry Department Seminars
 LUGAR DE PRESENTACIÓN: Texas A&M University AÑO: 1987

TÍTULO: Estudios de Doctorado en España y los EE. UU.
 ACTO: Celebración San Alberto Magno del Colegio de Químicos
 LUGAR DE PRESENTACIÓN: Colegio Universitario de Castellón AÑO: 1990

TÍTULO: Desarrollo de conductores moleculares orgánicos/inorgánicos
 ACTO: Seminario de Química Inorgánica
 LUGAR DE PRESENTACIÓN: Universidad de Tübingen AÑO: 1998

TÍTULO:

- Formación del enlace metal-metal. Fases clúster reducidas de haluros de metales de los grupos 3 y 4.
- Desarrollo de conductores moleculares orgánicos/inorgánicos
- Estudio sintético y estructural de clústeres de Molibdeno y Tungsteno con Azufre.

 ACTO: Ciclo de conferencias del Programa de Doctorado
 LUGAR DE PRESENTACIÓN: Universidad Católica de Valparaíso AÑO: 1999

TÍTULO: Cuboidal Clusters as Derivatives of the M₃Q₄ unit (M= MO, W, Re; Q= S, Se) containing phosphines
 ACTO: Reunión Proyecto INTAS
 LUGAR DE PRESENTACIÓN: Universidad de San Petersburgo AÑO: 2002

TÍTULO: Cubane-type cluster hydrides with [W₃CuS₄] and [W₃Se₄] units containing phosphines
 ACTO: 35th International Conference on Coordination Chemistry
 LUGAR DE PRESENTACIÓN: Universidad de Heidelberg AÑO: 2002

TÍTULO: New molecular conductors and magnets based on Mo₃S₇ and Mo₃CoS₄ cluster units
 ACTO: Conferencia invitada
 LUGAR DE PRESENTACIÓN: Universidad de Versalles AÑO: 2003

TÍTULO:	New molecular conductors and magnets based on Mo ₃ S ₇ and Mo ₃ CoS ₄ cluster units	
ACTO:	7 th FIGIPS Meeting in Inorganic Chemistry	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Universidad de Lisboa	AÑO: 2003
TÍTULO:	New molecular conductors and magnets based on Mo ₃ S ₇ and Mo ₃ Q ₄ Co (Q= S, Se) cluster units	
ACTO:	IXth International Seminar on Inclusion Compounds	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Russian Academy of Science (Novosibirsk)	AÑO: 2003
TÍTULO:	Single-Component Conductors Based on [Mo ₃ S ₇] Cluster Units with Dithiolate Ligands	
ACTO:	5 th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets (ISCOM'2003)	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Port Bourgenay (Francia)	AÑO: 2003
TÍTULO:	Cubane-type Molybdenum and Tungsten Sulfido Clusters with Potential Applications in Catalysis, Non-Linear Optics and Medicine	
ACTO:	Conferencia invitada	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Universidad de Ginebra (Suiza)	AÑO: 2004
TÍTULO:	Cubane-type Molybdenum and Tungsten Sulfido Clusters with Potential Applications in Catalysis, Non-Linear Optics and Medicine	
ACTO:	Conferencia invitada	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Universidad de Angers (Francia)	AÑO: 2004
TÍTULO:	Molecular conductors and Magnets Based on Molybdenum Cluster Sulfides	
ACTO:	Conferencia invitada	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Universidad de Angers (Francia)	AÑO: 2004
TÍTULO:	Development of single-component molecular magnetic conductors from trinuclear molybdenum cluster sulfides	
ACTO:	XXXVth International Conference on Coordination Chemistry	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Mérida-Yucatán (Méjico)	AÑO: 2004
TÍTULO:	Molecular Conductors and Magnets based on Trinuclear Molybdenum Cluster Sulfides	
ACTO:	Conferencia invitada	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Universidad de Kyoto (Japón) Universidad de Tokio (Japón) Universidad de Okayama (Japón)	AÑO: 2004
TÍTULO:	Molecular Conductors and Magnets based on Trinuclear Molybdenum Cluster Sulfides	
ACTO:	Conferencia invitada	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Universidad de Rennes (Francia) Laboratoire de Chimie de Coordination del CNRS, Toulouse (Francia)	AÑO: 2005

TÍTULO:	Molecular Magnetic Conductors based on Trinuclear Molybdenum Cluster Chalcogenides	
ACTO:	Conferencia invitada	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Universidad de Tuebingen (Alemania)	AÑO: 2006
TÍTULO:	Calcogenuros clúster tri- y tetranucleares de molibdeno y wolframio: de las estructuras en estado sólido a la catálisis asimétrica y los conductores moleculares	
ACTO:	Conferencia invitada	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Universidad Autónoma de Barcelona	AÑO: 2006
TÍTULO:	Chiral cubane type heterodimetallic molybdenum chalcogenides with diphosphine ligands and their applications in asymmetric catalysis	
ACTO:	Conferencia invitada	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Universitat de València	AÑO: 2006
TÍTULO:	Calcogenuros clúster tri- y tetranucleares de molibdeno y wolframio: de las estructuras en estado sólido a la catálisis asimétrica y los conductores moleculares	
ACTO:	Ciclo Conferencias "Ciencia y Tecnología Química"	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Universidad de Cádiz	AÑO: 2006
TÍTULO:	Group 6 transition metal cluster chalcogenides with perspectives in asymmetric catalysis and molecular electronics	
ACTO:	Simposio New directions in coordination chemistry	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Institute Nikolaev-RAS	AÑO: 2007
TÍTULO:	Group 6 metal cluster chalcogenides with perspectives in asymmetric catalysis and molecular electronics	
ACTO:	Simposio sobre materiales moleculares	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Universidad de Rennes	AÑO: 2007
TÍTULO:	Group 6 transition metal cluster chalcogenides: from solid state structures to functional molecular systems and supramolecular architectures	
ACTO:	Conferencia invitada	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Technische Universität Berlin	AÑO: 2009
TÍTULO:	Functional molecular systems based on transition metal cluster chalcogenides with potential applications in catalysis and molecular electronics	
ACTO:	Conferencia invitada	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Universidad Federal de Sao Carlos (Brasil)	AÑO: 2010
TÍTULO:	Functional molecular systems based on transition metal cluster chalcogenides with potential applications in catalysis	
ACTO:	Conferencia invitada	
LUGAR DE PRESENTACIÓN:	Instituto de Catálisis de Rostock (Alemania)	AÑO: 2010

TÍTULO: Functionalization of cluster chalcogenides directed to their applications in catalysis and molecula electronics
ACTO: Conferencia invitada
LUGAR DE PRESENTACIÓN: Universidad de Rennes (Francia) AÑO: 2012

TÍTULO: Functionalization of cluster chalcogenides directed to their applications in catalysis and molecula electronics
ACTO: Conferencia invitada
LUGAR DE PRESENTACIÓN: Universidad de Angers (Francia) AÑO: 2012

TÍTULO: Functionalization of cluster chalcogenides directed to their applications in catalysis and molecula electronics
ACTO: Conferencia invitada
LUGAR DE PRESENTACIÓN: Institute of Chemical Researchh ICIQ (Tarragona) AÑO: 2012

TRABAJOS DIRIGIDOS

BECA DE COLABORACIÓN	
TÍTULO:	Síntesis y caracterización de complejos clúster
ALUMNA:	Julia Ten Cebrián (MEC)
FECHA:	2002/2003

BECA DE COLABORACIÓN	
TÍTULO:	Obtención de nuevos complejos clúster de wolframio y renio con aplicaciones en medicina
ALUMNA:	María Dolores Segarra Maset
FECHA:	2003/2004

BECA DE COLABORACIÓN	
TÍTULO:	Utilización de compuestos tetranucleares con ligandos cianuro terminales en la construcción de compuestos de mayor nuclearidad
ALUMNO:	Ivan Sorribes Terrés (MCYT)
FECHA:	2006/2007

BECA DE COLABORACIÓN	
TÍTULO:	Activación de moléculas pequeñas en fase gas mediante complejos de metales del grupo 6 coordinados a fosfinas
ALUMNO:	Tomás Francisco Beltrán Álvarez (MICINN)
FECHA:	2007/2008

BECA DE COLABORACIÓN	
TÍTULO:	Activación y funcionalización de sustratos orgánicos en fase gas y en disolución mediante sulfuros metálicos clúster de los grupos 6 y 7 coordinados a fosfinas
ALUMNO:	Tomás Francisco Beltrán Álvarez (MICINN)
FECHA:	2008/2009

BECA DE COLABORACIÓN	
TÍTULO:	Síntesis de clústeres metálicos de molibdeno y wolframio con relevancia en catálisis y medicina
ALUMNO:	David Recatalà Ferrandis (MICINN)
FECHA:	2009/2010

BECA DE COLABORACIÓN	
TÍTULO:	Estudio de la actividad catalítica de compuestos clúster incorporados en matrices mesoporosas
ALUMNO:	Elena Pedrajas Gual (MICINN)
FECHA:	2011/2012

APOYO A LA INVESTIGACIÓN	
TÍTULO:	Apoyo a la investigación
TÉCNICO FP:	José Vicente Usagre Fernández (beca de la Generalitat Valenciana)
FECHA:	2001

APOYO A LA INVESTIGACIÓN

TÍTULO: Utilización simultánea de la química cuántica y la investigación experimental para el estudio del enlace químico y de mecanismos de reacción en clústeres metálicos

LICENCIADA: Sonia V. Triguero Bascañán (beca de la Generalitat Valenciana)

FECHA: 2003/2004

APOYO A LA INVESTIGACIÓN.

TÍTULO: Introducción a la química de coordinación

ESTUDIANTE: Bruno Martel (Programa Erasmus)

FECHA: Abril-agosto 2006

APOYO A LA INVESTIGACIÓN

TÍTULO: Introducción a la química de coordinación

TÉCNICO FP: Sascha Fetting (Programa Leonardo)

FECHA: Enero-febrero 2009

TESIS DE LICENCIATURA

TÍTULO: Obtención de nuevos cromóforos heterobimetálicos para óptica no lineal.

TESINANDO: José Antonio Mata Martínez

FECHA: 29 de Mayo de 1998

TESIS DE LICENCIATURA

TÍTULO: Síntesis y caracterización de clústeres trinucleares de molibdeno y wolframio con azufre

TESINANDO: Marta Feliz Rodríguez

FECHA: 21 de diciembre de 1999

TESIS DE LICENCIATURA

TÍTULO: Síntesis y caracterización de clústeres heterobimetálicos cuboidales $[M_3CuS_4]$ con M=Mo,W.

TESINANDO: Juan Manuel Garriga Porcar

FECHA: 11 de febrero de 2000

TESIS DE LICENCIATURA

TÍTULO: Síntesis y caracterización de clústeres trinucleares de molibdeno y wolframio con selenio y estudio de su reactividad.

TESINANDO: Cristian Vicent Barrera

FECHA: 25 de julio de 2000

TRABAJO DE INVESTIGACIÓN

TÍTULO: Síntesis estereoselectiva de clústeres quirales Mo_3CuS_4 catalíticamente activos

DOCTORANDO: Eva Guillamón Torres

FECHA: 30 de noviembre de 2005

TRABAJO DE INVESTIGACIÓN

TÍTULO: Oxocomplejos dinucleares y clústeres trinucleares con ligandos ditioleno: Síntesis y caracterización
DOCTORANDO: Sonia Triguero Bascuñán
FECHA: 30 de noviembre de 2005

TRABAJO DE INVESTIGACIÓN

TÍTULO: Hidrodefluoración de pentafluoropiridina catalizada por hidruros clúster de metales del grupo VI: estudio combinado teórico-experimental
DOCTORANDO: Tomás F. Beltrán Álvarez
FECHA: 27 de septiembre de 2010

TRABAJO FIN DE MASTER

TÍTULO: Transition metal clusters coordinated to redox active ligands
DOCTORANDO: Sebastian M. Krackl Scheuermann
FECHA: 22 de octubre de 2008 (Universidad de Colonia)

TRABAJO FIN DE MÁSTER

TÍTULO: Mixed-metal assemblies based on cyanide bridge cubane-type $\text{Mo}_3\text{CuS}_4/\text{Mo}_3\text{S}_4$ clusters and molybdenum carbonyls
DOCTORANDO: Iván Sorribes Terrés (becario FPI UJI/ FPU de MICINN)
FECHA: 28 de mayo de 2009

TRABAJO FIN DE MÁSTER

TÍTULO: Calcogenuros clúster de molibdeno con ligandos electroactivos
DOCTORANDO: David Recatala (becario FPU de MINECO)
FECHA: 21 de junio de 2011

TRABAJO FIN DE MÁSTER

TÍTULO: Preparación de hidruros clúster de molibdeno y wolframio y estudio de sus aplicaciones catalíticas en la hidrodefluoración de la pentafluoropiridina.
DOCTORANDO: Carmina Alfonso (contrato GV-Gerónimo Forteza)
FECHA: 25 de julio de 2011

TESIS DOCTORAL

TÍTULO: Estudio de las propiedades electrónicas y ópticas de compuestos de ferroceno funcionalizados con sistemas conjugados.
DOCTORANDO: José Antonio Mata Martínez (becario FPI de la GV)
FECHA: 29 de abril de 2002 (premio extraordinario)

TESIS DOCTORAL

TÍTULO: Tioclústeres de molibdeno y wolframio homo- y heterometálicos con estructura de cubano.
DOCTORANDA: Marta Feliz Rodríguez (técnico de apoyo a la investigación)
FECHA: 19 de Diciembre de 2003

TESIS DOCTORAL TÍTULO:	Calcogenos clúster de molibdeno y wolframio tri- y tetranucleares y su utilización en la preparación de conductores moleculares.
DOCTORANDO:	Cristian Vicent Barrera (becario proyecto)
FECHA:	20 de diciembre de 2004 (premio extraordinario)
TESIS DOCTORAL TÍTULO:	Materiales moleculares basados en calcogenos clúster de metales del grupo 6 con especies electroactivas
DOCTORANDA:	Sonia Verónica Triguero Bascuñán
FECHA:	20 de junio de 2008
TESIS DOCTORAL TÍTULO:	Clústeres calcogeno de metales del grupo 6 con relevancia en catálisis asimétrica y bifásica.
DOCTORANDA:	Eva María Guillamón Torres (becaria FPI del MEC)
FECHA:	5 de junio de 2009
TESIS DOCTORAL TÍTULO:	Funcionalización Química de Calcogenos Clúster de Molibdeno con Simetría C ₃ dirigida hacia sus Aplicaciones en Catálisis y el Diseño de Materiales
DOCTORANDO:	Iván Sorribes Terrés (becario FPU del MICINN)
FECHA:	17 de septiembre de 2012 (premio extraordinario)
TESIS DOCTORAL TÍTULO:	Clústeres heterobimetálicos cuboidales como catalizadores y/o precursores catalíticos
DOCTORANDA:	María Carolina Corao (Profesora visitante de la Universidad de Carabobo, Venezuela)
FECHA:	2 de agosto de 2013
TESIS DOCTORAL TÍTULO:	Clústeres sulfuro trimetálicos de molibdeno y wolframio funcionalizados con ligandos difosfina o aminofosfina y sus aplicaciones en catálisis orgánica
DOCTORANDO:	Tomás F. Beltrán Álvarez (becario FPI del MICINN)
FECHA:	27 de septiembre de 2013
TESIS DOCTORAL TÍTULO:	Desarrollo de complejos con ligandos electroactivos y estudio de sus propiedades ópticas y catalíticas.
DOCTORANDO:	David Recatalá Ferrandis (becario FPU del MINECO)
FECHA:	En realización
TESIS DOCTORAL TÍTULO:	Desarrollo y caracterización de clústeres M ₃ S ₄ coordinados a ligandos difosfina y aminofosfina y estudio de sus aplicaciones en reacciones de reducción de sustratos
DOCTORANDO:	Carmina Alfonso Padilla (becaria FPI del MINECO)
FECHA:	En realización

INVESTIGACIÓN POSTDOCTORAL

TÍTULO: Síntesis y caracterización de complejos cluster
INVESTIGADOR: Santiago Uriel Rubio (contratado postdoctoral del MEC)
FECHA: 1998-2000

INVESTIGACIÓN POSTDOCTORAL

TÍTULO: Complejos clúster coordinados a fosfinas electroactivas
INVESTIGADOR: Kaplan Karachi (investigador contratado doctor)
FECHA: 2007-2008

INVESTIGACIÓN POSTDOCTORAL

TÍTULO: Complejos clúster coordinados a especies electroactivas
INVESTIGADOR: Artem Gushchin (Becario postdoctoral Bancaja)
FECHA: 2009

INVESTIGACIÓN POSTDOCTORAL

TÍTULO: Complejos clúster coordinados a especies electroactivas
INVESTIGADOR: Artem Gushchin (Contratado postdoctoral MICINN)
FECHA: 2010/2011

OTROS MÉRITOS DE INVESTIGACIÓN

DOCTORA HONORÍFICA del Instituto Nikolaev de Química Inorgánica perteneciente a la "Russian Academy of Sciences- Siberian Branch".

CUATRO SEXENIOS de actividad investigadora reconocidos de acuerdo con las previsiones del R.D. 1086/1989 de 28 de agosto.

Participación como interlocutora válida por parte de la empresa "Productos Químicos del Mediterráneo" en los siguientes proyectos de investigación Universidad-Empresa parcialmente financiados por el Ministerio de Industria:

- Obtención de la ecuación de diseño en la deshidrogenación catalítica de alcoholes. Investigador principal: A. Corma (Instituto de Tecnología Química, Universidad Politécnica de Valencia)
Duración: 3/90-7/92
- Estudio teórico/experimental de la separación por destilación de los productos obtenidos en la deshidrogenación de alcoholes. Investigador principal: A. Aucejo (Universitat de València).
Duración: 3/90-6/90

Participación en varios subproyectos con la empresa "Corporación Química Vhem" sobre "Análisis de compuestos inorgánicos por difracción de rayos X" (1998-1999) al amparo del artículo 83 de la L.O. U.

Participación en varios proyectos de infraestructura científica: Caja Seca (1995), Laboratorio de Electroquímica (1995), Espectrofotómetro UV-visible (2000), Reactor de alta presión (2005) y Grandes Equipos de los Servicios Centrales de Instrumentación Científica (SCIC) de la Universitat Jaume I.

Responsable del equipo de difracción de rayos X en monocristal de los Servicios Centrales de la Universitat Jaume I (1998-actualidad) y responsable de los contratos de asistencia técnica relacionados con dicho equipo.

Evaluadora de Proyectos de la ANEP en las áreas de Química Física y Química Inorgánica

Evaluadora de Proyectos de la Agencia Nacional de Chile FONDECYT

Árbitro de las revistas científicas internacionales: Journal of the American Chemical Society, Inorganic Chemistry, European Journal of Inorganic Chemistry, Polyhedron.

Directora del grupo de investigación de Materiales Moleculares de la Universitat Jaume I, reconocido desde noviembre de 2005 como Unidad Asociada al Instituto de Ciencia Molecular de la UVEG mediante convenio de cooperación.

Miembro del Comité Científico Asesor de la Conferencia "3rd International Conference of the African Materials Research Society", Marrakech, 7-10 de Diciembre de 2005.

Organizadora de la XII Escuela Nacional de Materiales Moleculares (Benicasim, 7-11 Febrero de 2012)

Organizadora de la “III International Workshop on Transition Metal Clusters” (Benicasim, 6-9 Septiembre de 2012)

Miembro del Comité Científico Asesor de la Conferencia “International Conference on Coordination Chemistry”, Valencia, 9-13 de Septiembre de 2012.

GESTIÓN ACADÉMICA

Representante del Departamento de Ciencias Experimentales de la Universitat Jaume I en la Comisión de Investigación y Doctorado desde octubre de 1992 hasta octubre de 1994.

Miembro electo de la Junta de Centro de la Escuela Superior de Tecnología y Ciencias Experimentales de la Universitat Jaume I desde marzo de 1998 hasta marzo de 2002.

Representante del Departamento de Ciencias Experimentales de la Universitat Jaume I en la Comisión de Asuntos Económicos e Informáticos desde febrero de 2002 hasta junio de 2006.

Vicerrectora de Investigación desde el 15 de junio de 2006 hasta el 13 de junio de 2010.

Directora de los Servicios Centrales de Instrumentación Científica desde el 14 de junio de 2010.

OTROS MÉRITOS O ACLARACIONES QUE DESEE HACER CONSTAR

Premio extraordinario de licenciatura

Certificado de Aptitud Pedagógica (I. C. E.)

Miembro del Ilustre Colegio Oficial de Químicos

Miembro de la Real Sociedad Española de Química

Miembro de la “American Chemical Society”



**Comisión Interministerial de Ciencia y
Tecnología**

Curriculum vitae

Nombre: JUAN TEODOMIRO LÓPEZ NAVARRETE

Fecha: 31 diciembre de 2013

Apellidos: López Navarrete
Nombre: Juan Teodomiro
DNI.:
Fecha de nacimiento:
Sexo: Hombre

Situación Profesional actual

Organismo: Universidad de Málaga
Centro: Facultad de Ciencias
Departamento: Química Física
Dirección postal: Campus de Teatinos s/n. 29071-Málaga
Teléfono: 952132018
Fax: 952132000
Correo elec.: teodomiro@uma.es
Especialización (Códigos Unesco): 2210.20, 2206.08, 2206.09, 2206.10, 2209.14,
2211.09, 2306.10, 3312.08.
Categoría Profesional: Catedrático de Universidad
Fecha inicio: 06/11/2008
Situación administrativa: Plantilla
Dedicación: A tiempo completo

Líneas de investigación

- Espectroscopía vibracional de compuestos heterociclos.
 - Dinámica reticular de sistemas organizados en redes mono, bi y tridimensionales.
 - Caracterización espectroscópica (UV-VIS-NIR, Infrarroja y Raman), electroquímica y electroquímica de sistemas moleculares electroactivos: *Sistemas macrocíclicos, polímeros conductores, oligómeros conjugados, aceptores y dadores electrónicos, Fullerenos, nanotubos de carbono.*
 - Caracterización teórica (cálculos químico-cuánticos) de sistemas moleculares electroactivos: Estructura molecular, estructura electrónica y vibracional, estados de oxidación, estados excitados.
-

Formación Académica

Titulación Superior	Institución	Fecha
Licenciado en Ciencias Químicas	Universidad de Extremadura	Junio/1982
Grado de Licenciado	Universidad de Extremadura	12/11/1982

Doctorado	Institución	Fecha
Doctor en Ciencias	Universidad de Málaga	13/12/1985

Actividades anteriores de carácter científico profesional

Puesto	Institución	Fechas
Becario PGFPI (MEC)	Universidad de Extremadura	1/01/1983–30/09/1983
Becario PGFPI (MEC)	Universidad de Málaga	1/10/1983–30/09/1986
Becario Postdoctoral en el Extranjero (MEC)	Politécnico de Milán (ITALIA)	1/10/1986–30/09/1988
Becario de Reincorporación (MEC)	Universidad de Málaga	1/10/1988–31/10/1988
Profesor Ayudante (L.R.U.)	Universidad de Málaga	1/11/1988–31/12/1988
Profesor Titular Universidad (Interino)	Universidad de Málaga	1/01/1989–20/11/90
Profesor Titular Universidad	Universidad de Málaga	21/11/90–05/11/2008
Habilitación de Catedrático de Universidad	Universidad de Barcelona	BOE 08/04/2008
Catedrático de Universidad	Universidad de Málaga	06/11/2008–hasta la fecha

Idiomas

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Inglés	Bien	Correctamente	Bien
Italiano	Correctamente	Correctamente	Correctamente

Participación en Proyectos de I + D financiados en convocatorias públicas

Título del proyecto: *Construcción de un espectrómetro Raman a partir de un monocromador ya existente para el estudio de vibracional de complejos.*

Entidad financiadora: Proyecto CAYCIT nº 994-81.

Investigador responsable: Dr. Juan Francisco Arenas Rosado.

Título del proyecto: *Complejos derivados de diazinas, estudios de los espectros IR y Raman y aspectos conformacionales de los ligandos piridazina y metilpiridazinas.*

Entidad financiadora: Proyecto CAYCIT nº 961-84.

Investigador responsable: Dr. Juan Francisco Arenas Rosado.

Título del proyecto: *Progetto coordinato di ricerca sulla commutazione ottica: sintesi, dinamica molecolare e spettroscopia ottica di sistemi molecolari per ottica non lineare.*

Entidad financiadora: Consiglio Nazionale delle Ricerche (ITALIA).

Duración: desde: 1 de enero de 1988 hasta: 1 de octubre de 1988

Investigador responsable: Dr. Giuseppe Zerbi.

Título del proyecto: *Aplicaciones a la tecnología de polímeros conductores de electricidad de sus propiedades espectroscópicas y estructurales: polímeros constituidos por unidades aromáticas y heteroaromáticas.*

Entidad financiadora: Proyecto DGICYT PB88/0529.

Duración: desde: 1 de julio de 1989 hasta: 1 de julio de 1992

Investigador responsable: Dr. Juan Francisco Arenas Rosado.

Cuantía: 13.500.000 pts.

Número de investigadores participantes: 6

Título del proyecto: *Espectrofotómetro de Infrarrojos por Transformada de Fourier.*

Entidad financiadora: Secretaría General de Universidades e Investigación, Consejería de Educación y Ciencia, Junta de Andalucía. Ayuda para equipamiento e infraestructura científica.

Duración: 1 año (1990).

Cuantía: 10.000.000 pts.

Investigador Principal: Juan Francisco Arenas Rosado.

Título del proyecto: *Caracterización por espectroscopías ópticas (IR, Raman y UV-VIS-NIR) y modelización químico cuántica de materiales orgánicos policonjugados con aplicaciones en electrónica molecular y optoelectrónica: sistemas oligotiofénicos y polialquiltiofénicos.*

Entidad financiadora: Proyecto DGICYT PB93/1244.

Duración: desde: 27 de julio de 1994 hasta: 27 de julio de 1997

Cuantía: 5.000.000 pts.

Investigador responsable: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete.

Número de investigadores participantes: 5

Título del proyecto: *Infraestructura de Investigación: Sistema Multiprocesador. PROGRAMA NACIONAL DE TECNOLOGIA DE LA INFORMACION Y LAS COMUNICACIONES (M.E.C.).*

Entidad financiadora: Proyecto CICYT IN94/0406

Duración: desde: 1 de enero de 1995 hasta: 1 de diciembre de 1995

Cuantía: 18.000.000 pts.

Investigador responsable: Dr. Emilio López Zapata.

Número de investigadores participantes: 8

Título del proyecto: *Infraestructura de Investigación: Sistema Modular para espectroscopías FT-IR, FT-Raman y Microscopía FT-IR. PROGRAMA NACIONAL DE MATERIALES (M.E.C.).*

Entidad financiadora: Proyecto CICYT IN95/0199.

Duración: desde: 1 de enero de 1996 hasta: 1 de diciembre de 1996

Cuantía: 10.000.000 pts.

Investigador responsable: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete.

Número de investigadores participantes: 10

Título del proyecto: *Sistemas moleculares electroactivos: caracterización espectroscópica y modelización químico cuántica de materiales oligotiofénicos con estructura molecular definida.*

Entidad financiadora: Proyecto DGES PB96/0682.

Duración: desde: 1 de octubre de 1997 hasta: 1 de octubre de 2000

Cuantía: 7.000.000 pts.

Investigador responsable: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete

Número de investigadores participantes: 5

Título del proyecto: *Utilización de la química de coordinación para la preparación de materiales de interés tecnológico: polímeros conductores orgánicos/inorgánicos para electrodos de baterías y dispositivos electrocrómicos. Espinelas de composición y tamaño de partícula controlado para pigmentos cerámicos y nanopartículas magnéticas.*

Entidad financiadora: Proyecto coordinado FEDER 1FD97-1765-C03-03 (MAT).

Entidades participantes: Universitat de València, Universidad de Castellón y Universidad de Málaga.

Duración: desde: 30 de diciembre de 1999 hasta: 31 de diciembre de 2001

Coordinador general: Dr. Eugenio Coronado Miralles (Universidad de Valencia).

Investigador responsable subproyecto UMA: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete.

Cuantía del subproyecto UMA: 5.500.000 pts.

Número de investigadores participantes: 2 en el subproyecto UMA.

Título del proyecto: *Caracterización espectroscópica y modelización químico-cuántica de materiales orgánicos policonjugados electroactivos: oligotiofenos sustituidos con dadores y aceptores electrónicos.*

Entidad financiadora: Proyecto DGI BQU2000-1156.

Duración: desde: 20 de diciembre de 2000 hasta: 20 de diciembre de 2003

Cuantía: 9.000.000 pts.

Investigador responsable: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete.

Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: *Espectropolarímetro para Dicroísmo Circular Electrónico (CD), con accesorios para análisis HPLC-CD.*

Entidad financiadora: Secretaría General de Universidades e Investigación, Consejería de Educación y Ciencia, Junta de Andalucía. Ayuda para equipamiento e infraestructura científica. LJC/GGM. Nº de registro: 55703.

Duración: 1 año (2002).

Cuantía: 24.000,00 €.

Investigador responsable: Dr. Francisco Javier Ramírez Aguilar.

Título del proyecto: *Espectrómetro de Masas de Iones Secundarios.*

Entidad financiadora: Convocatoria de Infraestructura FEDER-MEC.

Duración: desde: 1 de enero de 2003 hasta: 30 de diciembre de 2004

Cuantía: 375.000 €.

Investigador responsable: Dr. J. Javier Laserna Vázquez.

Título del proyecto: *Estudio espectroscópico, electroquímico, espectroelectroquímico y químico-cuántico de Materiales Moleculares con aplicaciones en electrónica molecular.*

Entidad financiadora: Proyecto DGI BQU2003-3194.

Duración: desde: 1 de diciembre de 2003 hasta: 30 de noviembre de 2006

Cuantía: 134.435 €.

Investigador responsable: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete.

Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: *Equipamiento para los Servicios Centrales de Investigación.*

Entidad financiadora: Convocatoria de Infraestructura FEDER-MEC.

Duración: desde: 1 de enero de 2005 hasta: 1 de diciembre de 2006

Cuantía: 960.000 €.

Investigador responsable: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete.

Título del proyecto: *Moléculas policonjugadas para electrónica y fotónica molecular: establecimiento de relaciones estructura-propiedad a partir de medidas espectroscópicas y electroquímicas.*

Entidad financiadora: Proyecto coordinado DGI (MEC) CTQ2006-14987-C02-01.

Entidades participantes: Universitat de Valencia y Universidad de Málaga.

Duración: desde: 1 de octubre de 2006 hasta: 30 de septiembre de 2009

Coordinador general: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete.

Investigador responsable subproyecto UMA: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete.

Cuantía subproyecto (UMA): 157.300 €.

Número de investigadores participantes: 6 U.Málaga.

Título del proyecto: *Materiales para electrónica y fotónica molecular: diseño y caracterización de biosensores nanoestructurados.*

Entidad financiadora: Proyecto de Investigación de Excelencia (Junta de Andalucía). P06-FQM-01678.

Duración: desde: 1 de febrero de 2007 hasta: 31 de enero de 2010

Cuantía: 187.536 €

Investigador responsable: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete

Número de investigadores participantes: 9

Título del proyecto: *Infraestructura y equipamiento científico de la Universidad de Málaga: Infraestructura científica para los Servicios Centrales de Apoyo a la Investigación*

Entidad financiadora: Convocatoria de Infraestructura Junta de Andalucía

Duración: desde: 1 de enero de 2009 hasta: 31 de diciembre de 2010

Cuantía: 2.760.000 €.

Investigador responsable: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete.

Título del proyecto: *Implementación del Centro de Biocomputación y Nanotecnología de la Universidad de Málaga.*

Entidad financiadora: Ayudas de Plan Nacional de I+D+I y de implantación y mejora de infraestructuras utilizables para actuaciones científicas en Parques Científicos y Tecnológicos (PCT-010000-2006-30).

Anualidad 2006: 2.329.161 €.

Anualidad 2007: 7.670.000 €.

Título del proyecto: *Equipamiento y modernización de los Servicios Centrales de Investigación.*

Entidad financiadora: Convocatoria de Infraestructura FEDER-MEC.

Duración: 2010-2011

Cuantía: 3.299.512 €.

Investigador responsable: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete.

Título del proyecto: *Nuevos sistemas policonjugados para electrónica y fotónica molecular: Control intra- y supramolecular de propiedades optoelectrónicas a partir de medidas espectroscópicas y cálculos químico-cuánticos.*

Entidad financiadora: Proyecto del Plan Nacional de I+D+I (MCINN) CTQ2009-10098

Entidades participantes: Universidad de Málaga.

Duración: desde: 1 de enero de 2010 hasta: 31 de diciembre de 2012

Investigador responsable: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete.

Cuantía: 356.950 €.

Número de investigadores participantes: 10

Título del proyecto: *Materiales para electrónica y fotónica molecular: preparación y caracterización de transistores orgánicos de efecto campo (OFET)*

Entidad financiadora: Proyecto de Investigación de Excelencia (Junta de Andalucía). P09-FQM-0478

Duración: desde: 1 de febrero de 2010 hasta: 31 de enero de 2014

Cuantía: 205.000 €

Investigador responsable: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete

Número de investigadores participantes: 10

Título del proyecto: "OPTIMIZATION OF ORGANIC THIN-FILM TRANSISTORS FOR PLASTIC ELECTRONICS: TOWARDS TRANSPARENT COMPONENTS IN NEW DEVICES (ORGANIC ELECTRONICS)"

Entidad financiadora: MARIE CURIE IOF ("International Outgoing Fellowship"). Grant Agreement PIOF-GA-2009-234808. The European Commission (UE)

Marie Curie fellowship: Dr. Rocío Ponce Ortiz (24 meses en Northwestern University, USA; 12 meses en la Universidad de Málaga).

Cuantía: 237.286,61 €

Duración: desde: 20 de octubre de 2009 hasta: 08 de febrero de 2013

Investigador responsable: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete, supervisor científico responsable de la coordinación del proyecto. Dr. Tobin J. Marks, supervisor científico de las actividades investigadoras desarrolladas en la NU.

Título del proyecto: *Equipamiento y modernización de los Servicios Centrales de Investigación de la Universidad de Málaga* (Ref.:UNMA10-1E-743)

Entidad financiadora: SUBPROGRAMA DE PROYECTOS DE INFRAESTRUCTURA CIENTÍFICO-TECNOLÓGICA COFINANDADOS CON FEDER

Duración: 2011-2013

Cuantía: 4.073.281 €.

Investigador responsable: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete.

Título del proyecto: *Estudio espectroscópico y teórico de materiales orgánicos para electrónica molecular*

Entidad financiadora: Proyecto del Plan Nacional de I+D+I (MINECO) CTQ2012-33733

Entidades participantes: Universidad de Málaga.

Duración: desde: 1 de enero de 2013 hasta: 31 de diciembre de 2015

Investigador responsable: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete.

Cuantía: 284.310 €.

Número de investigadores participantes: 10

Título del proyecto: “Carbon Nanostructures for Application to Molecular Photovoltaics (CNAMP)”

Entidad financiadora: Marie Curie programme “U-Mobility”, co-financed by Universidad de Málaga and the European Union’s Seventh Framework Programme (FP7/2007-2013) under Grant Agreement No. 246550

Marie Curie fellowship: Dr. María Moreno Oliva (24 meses en Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (Alemania); 12 meses en la Universidad de Málaga)

Cuantía: 120.000 € (coste salarial base)

Duración: desde: 13 de agosto de 2012 hasta: 12 de agosto de 2015

Investigador responsable: Dr. Juan Teodomiro López Navarrete, supervisor científico responsable de la coordinación del proyecto; Dr. Dirk Michael Guldi, supervisor científico de las actividades investigadoras desarrolladas en la FAU.

- Ayudas a Grupos de Investigación del Plan Andaluz de Investigación (PAI)

* Ayudas de la Junta de Andalucía para la Consolidación de Grupos de Investigación. Investigador del Grupo 6002. Años 1985, 1988, 1989 y 1990. (Responsable: Dr. Juan F. Arenas Rosado).

* Investigador Responsable del Grupo de Investigación Consolidado *Polímeros Conductores y Biopolímeros* (Código FQM159). Actualmente 10 miembros (6 doctores + 4 PIF):

Convocatoria 1991: 1.012.962 pts. (puntuación: 10/20).

Convocatoria 1993: 1.149.733 pts. (puntuación: 12/20).

Convocatoria 1995: 2.934.000 pts. (puntuación: 23.5/30).

Convocatoria 1997: 1.953.131 pts. (puntuación: 24/25). Grupo de Excelencia.

Convocatoria 2001: 885.888 pts. (puntuación: 24/25). Grupo de Excelencia.

Convocatoria 2002: 31.216,00 €. (puntuación: 25/25). Grupo de Excelencia.

Convocatoria 2003: 12.045,67 €. (puntuación: 25/25). Grupo de Excelencia.

Convocatoria 2004: 10.411,23 €. (puntuación: 25/25). Grupo de Excelencia.

Convocatoria 2005: 12.505,43 €. (puntuación: 32/32). Grupo de Excelencia.

Convocatoria 2006: 9.691,65 €. (puntuación: 32/32). Grupo de Excelencia.

Convocatoria 2007: 18.848,83 € (puntuación : 35/35). Grupo de Excelencia

Convocatoria 2008: 23.996,69 € (puntuación : 32/32). Grupo de Excelencia
 Convocatoria 2009: 13.000,00 € (puntuación : 32/32). Grupo de Excelencia
 Convocatoria 2010: 6.000,00 € (puntuación : 32/32). Grupo de Excelencia
 Convocatoria 2012: 6.000,00 € (puntuación : 32/32). Grupo de Excelencia

- Participación en Redes temáticas y Acciones Coordinadas.

Título de la Acción: *Materiales Moleculares y Polímeros Funcionales para Componentes Avanzados.*

Entidad financiadora: Acción COST-518 (CICYT)

Entidades participantes: 11 Universidades y CSIC.

Duración: 1996-1998

Comité de Gestión Nacional: Dr. Rafael Alcalá (U. Zaragoza), Dr. T. Torres (U.A. Madrid).

Investigador responsable UMA: Dr. Juan T. López Navarrete.

Título de la Red: *Polímeros Orgánicos / Inorgánicos Conductores*

Entidad financiadora: Generalitat Valenciana (XT00-5)

Entidades participantes: Univ. de València, Univ. Jaume I de Castellón, Univ. de Málaga y Univ. Politéc. de Cartagena

Duración: desde: Enero 2000 hasta: Nov. 2000

Cuantía de la subvención: 500.000 pts

Investigador responsable: Dr. E. Coronado Miralles.

Investigador responsable UMA: Dr. Juan T. López Navarrete.

Título de la Red: *Polímeros Orgánicos / Inorgánicos Conductores*

Entidad financiadora: Generalitat Valenciana (XT01-5)

Entidades participantes: Univ. de València, Univ. Jaume I de Castellón, Univ. de Málaga y Univ. Politéc. de Cartagena

Duración: desde: Enero 2001 hasta: Nov. 2001

Cuantía de la subvención: 500.000 pts

Investigador responsable: Dr. E. Ortí Guillén.

Investigador responsable UMA: Dr. Juan T. López Navarrete.

Título de la Acción: *Caracterización Estructural y Funcional de la Interacción de Macromoléculas Biológicas con Metabolitos o Análogos de Interés en Biomedicina y Desarrollo Farmacéutico.*

Entidad financiadora: Secretaría General de Universidades e Investigación, Consejería de Educación y Ciencia, Junta de Andalucía. Acción coordinada de grupos de investigación del P.A.I. LJC/GGM. Nº de registro: 55706.

Duración: 1 año (2002).

Cuantía de la subvención: 18.030,36 €.

Investigador responsable: Dr^a. Francisca Sánchez Jiménez.

Título de la Red: *Red Temática Local sobre Nanociencia y Nanotecnología en Química y Energía.*

Entidad financiadora: Universidad de Málaga

Entidades participantes: Ocho grupos de investigación de la Universidad de Málaga.

Duración: desde: Junio 2007

Cuantía de la subvención: 4.000 €.

Coordinador responsable: Dr. José R. Ramos Barrado.

Título de la Red: *Red Temática Local sobre Arqueometría*

Entidad financiadora: Universidad de Málaga

Entidades participantes: Diez grupos de investigación de la Universidad de Málaga.

Duración: desde: Enero 2011

Cuantía de la subvención: 4.000 €.

Coordinador responsable: Dr. V. Hernández Jolín

- Otras ayudas o subvenciones.

Centro de Investigaciones Energéticas, Medioambientales y Tecnológicas (CIEMAT).

División de Tecnología de la Información y las Comunicaciones (MEC).

Uso del Supercomputador SGI JEN50 para el desarrollo de proyectos de investigación del Plan Nacional.

Desde 1996-2006

Publicaciones o Documentos Científico-Técnicos

(CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = "review", E = editor, S = Documento Científico-Técnico restringido.)

1

AUTORES: J.F. Arenas, J.T. López Navarrete, J.C. Otero, J.I. Marcos, A. Cardenete
TÍTULO: VIBRATIONAL SPECTRA OF (¹H₄) PYRAZINE AND (²H₄) PYRAZINE
REF. REVISTA: *J. Chem. Soc., Faraday Transactions II*, **81**, pág. 405-415. (1985). CLAVE A

2

AUTORES: J.F. Arenas, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos, J.C. Otero
TÍTULO: A MINDO/3 HARMONIC FORCE FIELD FOR PYRAZINE IN PLANE A_g AND B_{3u} VIBRATIONS.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.* **142**, pág.295-298. (1986). CLAVE A

3

AUTORES: J.F. Arenas, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos, J.C. Otero
TÍTULO: CONFORMATIONS AND VIBRATIONAL SPECTRA OF METHYL PYRAZINES
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.* **142**, pág. 423-426. (1986). CLAVE A

4

AUTORES: J.F. Arenas, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos, J.C. Otero.
TÍTULO: FORCE FIELD FOR IN -PLANE VIBRATIONS OF PYRAZINE
REF. REVISTA: *Spectrochim. Acta*, **42A**, pág.1343-1348. (1986). CLAVE A

5

AUTORES: J.F. Arenas, J.I. Marcos, J.T. López Navarrete, J.C. Otero.
TÍTULO: FORCE FIELD FOR OUT-OF-PLANE VIBRATIONS OF PYRAZINE.
REF. REVISTA: *Coll. Czec. Chemi. Comm.* **51**, pág. 2656-2664. (1986). CLAVE A

6

AUTORES: J.F. Arenas, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos, J.C. Otero.
TÍTULO: MINDO/3 VIBRATIONALF STUDY OF 1,4.-DIOXADIENE AND CANONIC QUADRATIC FORCE FIELD.
REF. REVISTA: *Can. J. of Spectrosc.* **32**, pág. 14-18. (1987). CLAVE A

7

AUTORES: J. T. López Navarrete, G.Zerbi.
TÍTULO: ON THE PROBLEM OF Π ELECTRON DELOCALISATION ACROSS SP³ CARBON ATOMS INTRODUCED AS DEFECT IN POLYACETYLENE.
REF. REVISTA: *Solid State Comm.* **64**, pág. 1183-1186. (1987). CLAVE A

8

AUTORES: J.F Arenas, J. T. López Navarrete, J.I. Marcos, J.C. Otero.
TÍTULO: VIBRATIONAL SPECTRUM AND INTERNAL ROTATION IN 2,5-DIMETHYLPYRAZINE.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **162**, pág. 263-272. (1987). CLAVE A

9

AUTORES: J.F Arenas, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos, J.C. Otero.
TÍTULO: VIBRATIONAL SPECTRUM AND INTERNAL ROTATION IN 2-METHYLPYRAZINE.
REF. REVISTA: *J. Chem. Soc., Faraday Transactions II*, **84**, pág. 53-65. (1988). CLAVE A

10

AUTORES: J.F. Arenas, J. T. López Navarrete, J.I. Marcos, J.C. Otero.
TÍTULO: ESTRUCTURA MOLECULAR, ESPECTROS INFRARROJO Y RAMAN DE LA TRIMETILPIRAZINA.
REF. REVISTA: *Opt.Pura Apl.*, **21**, pág. 107-112. (1988). CLAVE A

11

AUTORES: J.T. López Navarrete, G.Zerbi.
TÍTULO: LATTICE DYNAMICS AND INFRARED SPECTRA OF DOPING INDUCED AND PHOTOEXCITED POLYACETYLENE.
REF. REVISTA: *Solid State Comm.*, **65**, pág. 409-414. (1988). CLAVE A

12

AUTORES: C.Castiglioni, J.T. López Navarrete, G.Zerbi, M.Gussoni.
TÍTULO: A SIMPLE INTERPRETATION OF THE VIBRATIONAL SPECTRA OF UNDOPED, DOPED AND PHOTOEXCITED POLYACETYLENE: AMPLITUDE MODE THEORY IN THE GF FORMALISM.
REF. REVISTA: *Solid State Comm.*, **65**, pág. 625-630. (1988). CLAVE A

13

AUTORES: C.Castiglioni, J.T. López Navarrete, M.Gussoni, G.Zerbi.
TÍTULO: INTERPRETATION OF THE VIBRATIONAL SPECTRA OF PRISTINE, DOPED AND PHOTOINDUCED POLYACETYLENE.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **174**, pág. 375-382. (1988). CLAVE A

14

AUTORES: J.T. López Navarrete, G.Zerbi.
TÍTULO: PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y VIBRACIONALES DE POLIMEROS CONDUCTORES A PARTIR DE CALCULOS QUIMICO CUANTICOS.
REF. REVISTA: *Opt. Pura Apl.*, **21**, pág. 63-69. (1988). CLAVE R

15

AUTORES: C.Castiglioni, M.Gussoni, J.T. López Navarrete, G.Zerbi.
TÍTULO: FTIR SPECTRA (FREQUENCY AND INTENSITY) OF POLY(PARA-PHENYLENE).
REF. REVISTA: *Mikrochim. Acta*, **I**, pág. 247-249. (1988) CLAVE A

 16

AUTORES: J.T.López Navarrete, G.Zerbi.
TÍTULO DEL CAPITULO: Clustering of Charge Carriers in Doped Electrically Conducting Polymers.
TÍTULO DEL LIBRO: XI International Conference on Raman Spectroscopy.
EDITORES: R.H.J.Clark and D.A.Long.
EDITORIAL, PAIS, CIUDAD: Jhon Wiley and Sons, Londres (U.K.). 1988.
ISBN: 0 471 92094 0 CLAVE CL

17

AUTORES: J. F. Arenas, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos, J.C. Otero.
TÍTULO: VIBRATIONAL SPECTRUM, RAMAN AND INFRARED, AND MOLECULAR STRUCTURE OF TETRAMETHYLPYRAZINE.
REF. REVISTA: *Opti. Pura Apl.*, **22**, pág. 9-13. (1989). CLAVE A

18

AUTORES: J. F. Arenas, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos, J.C. Otero.
TÍTULO: VIBRATIONAL SPECTRUM AND INTERNAL ROTATION IN 2,6 -DIMETHYLPYRAZINE.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **197**, pág. 87-95. (1989). CLAVE A

19

AUTORES: J. F. Arenas, J. T. López Navarrete, J.I. Marcos, J. C. Otero.
TÍTULO: VIBRATIONAL SPECTRUM AND INTERNAL ROTATION IN 2,3,-DIMELTHYLPYRAZINE.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **192**, pág. 107-115. (1989). CLAVE A

20

AUTORES: J. F. Arenas, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos, J.J.Romero.
TÍTULO: CAMPO DE FUERZAS ARMONICO MINDO/3 PARA PIRIDAZINA.
REF. REVISTA: *Opt. Pura Apl.* , **22**, pág. 103-114 (1989). CLAVE A

21

AUTORES: J.T. López Navarrete, G.Zerbi.
TÍTULO: CHARGE LOCALISATION IN DOPED SEGMENTED POLYACETYLENE.
REF. REVISTA: *Solid State Comm.* , **69**, pág. 281-284. (1989). CLAVE A

22

AUTORES: J.T. López Navarrete, G.Zerbi.
TÍTULO: STRUCTURE, LATTICE VIBRATIONS AND SPECTRA OF PRISTINE AND DOPED POLYTHIOPHENE.
REF. REVISTA: *Synth. Metals*, **28**, pág. C15-C20. (1989). CLAVE A

23

AUTORES: G.Zerbi, C.Castiglioni, J.T. López Navarrete, B.Tian, M.Gussoni.
TÍTULO: A MOLECULAR VIEWPOINT OF LATTICE DYNAMICS AND SPECTRA OF CONDUCTING POLYMERS.
REF. REVISTA: *Synth. Metals*, **28**, pág. D359-D368. (1989). CLAVE A

24

AUTORES: J.T. López Navarrete, G.Zerbi.
TÍTULO: LONGE RANGE INTERACTIONS AND MOLECULAR DYNAMICS OF POLYENES: POLYACETYLENE.
REF. REVISTA: *Synth. Metals*, **32**, pág. 151-169. (1989). CLAVE A

25

AUTORES: J.T. López Navarrete, B.Tian, G.Zerbi.
TÍTULO: RELATION BETWEEN EFFECTIVE CONJUGATION VIBRATIONAL FORCE CONSTANTS AND ELECTRONIC PROPERTIES IN POLYCONJUGATED MATERIALS.
REF. REVISTA: *Solid State Comm.*, **74**, pág. 199-202. (1990). CLAVE A

26

AUTORES: V.Hernández, J.T. López Navarrete, J.I.Marcos.
TÍTULO: INTERNAL ROTATION AND VIBRATIONAL PROPERTIES OF POLYFURAN OLIGOMERS.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **219**, pág. 397-402. (1990). CLAVE A

27

AUTORES: J.T. López Navarrete, B.Tian, G.Zerbi.
TÍTULO: CHAIN FLEXIBILITY IN POLYHETEROAROMATIC POLYMERS: ELECTRONIC PROPERTIES, STRUCTURE AND VIBRATIONAL SPECTRA OF OLIGOMERS AS MODEL OF POLYPYRROL AND POLYTHIOPHENE.
REF. REVISTA: *Synth. Metals*, **38**, pág. 299-312. (1990). CLAVE A

28

AUTORES: J.T. López Navarrete, G.Zerbi.
TÍTULO: ON THE STABILITY OF DOPED CONDUCTING POLYMERS: ELECTROSTATIC CONTRIBUTIONS AND STERICAL EFFECTS.
REF. REVISTA: *Chem. Phys. Lett.* **175**, pág. 125-129. (1990). CLAVE A

29

AUTORES: M.N. Ramos, J.T. López Navarrete, S.J. de Melo, C. Luu-Duc
TÍTULO: SOME CONSIDERATIONS ON THE CHEMICAL REACTIVITY OF PYRROLE 2-CARBOXALDEHIDE.
REF. REVISTA: *Pharmazie*, **45(H 11)**, pág. 866-867. (1990). CLAVE A

30

AUTORES: V.Hernández, J.T. López Navarrete, J.I.Marcos.
TÍTULO: CONFORMATIONAL AND VIBRATIONAL PROPERTIES OF POLY(3-METHYLTHIOPHENE).
REF. REVISTA: *Synth. Metals*, **43**, pág. 3501-3504. (1991). CLAVE A

 31

AUTORES: V.Hernández, J.T. López Navarrete, J.I.Marcos.
TÍTULO: ELECTRONIC STRUCTURE AND LATTICE DYNAMICS OF POLYFURAN.
REF. REVISTA: *Synth. Metals*, **41**, pág. 789-792. (1991). CLAVE A

32

AUTORES: J.T. López Navarrete, G.Zerbi.
TÍTULO: LATTICE DYNAMICS AND VIBRATIONAL SPECTRA OF POLYTHIOPHENE. I: OLIGOMERS AND POLYMER.
REF. REVISTA: *J. Chem. Phys.* **94**, pág. 957-964. (1991). CLAVE A

33

AUTORES: J.T. López Navarrete, G.Zerbi.
TÍTULO: LATTICE DYNAMICS AND VIBRATIONAL SPECTRA OF POLYTHIOPHENE. II: EFFECTIVE COORDINATE THEORY, DOPED INDUCED AND PHOTOEXCITED SPECTRA.
REF. REVISTA: *J. Chem. Phys.*, **94**, pág.965-970. (1991). CLAVE A

34

AUTORES: J.T. López Navarrete, J.J.Quirante, F.J.Ramírez
TÍTULO: HARMONIC FORCE FIELD FOR GLYCINE MOLECULE BY SEMIEMPIRICAL METHODS.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **268**, pág. 249-261. (1992). CLAVE A

35

AUTORES: V.Hernández, F.J.Ramírez, G.Zotti, J.T. López Navarrete,
TÍTULO: RESONANCE RAMAN AND FTIR SPECTRA OF PRISTINE AND DOPED POLYCONJUGATED POLYFURAN.
REF. REVISTA: *Chem. Phys. Lett.* **191**, pág. 419-422. (1992). CLAVE A

36

AUTORES: V.Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: LATTICE DYNAMICS AND VIBRATIONAL SPECTRA OF PRISTINE, DOPED AND PHOTOEXCITED POLY(3-METHYLTHIOPHENE).
REF. REVISTA: *Synth. Metals*, **51**, pág. 211-218. (1992).
TÍTULO DEL LIBRO,EDITOR O COORDINADOR: Polyconjugated Materials, Editor: G.Zerbi.
EDITORIAL, PAIS, CIUDAD: Elsevier North-Holland, Amsterdam 1992.
ISBN: 0 444 89573 6 CLAVE A, CL

37

AUTORES: J. Soto, V.Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: CONFORMATIONAL STUDY AND LATTICE DYNAMICS OF POLY(P-PHENYLENE): OLIGOMERS AND POLYMER.
REF. REVISTA: *Synth. Metals*, **51**, pág. 219-238. (1992).
TÍTULO DEL LIBRO,EDITOR O COORDINADOR: Polyconjugated Materials, Editor: G.Zerbi.
EDITORIAL, PAIS, CIUDAD: Elsevier North-Holland, Amsterdam 1992.
ISBN: 0 444 89573 6 CLAVE A, CL

38

AUTORES: V.Hernández, F.J.Ramírez, G.Zotti, J.T. López Navarrete
TÍTULO: LATTICE DYNAMICS AND VIBRATIONAL SPECTRA OF
PRISTINE AND DOPED POLYCONJUGATED POLYFURAN.
REF. REVISTA: *J. Chem. Phys.*, **98**, pág. 769-783. (1993). CLAVE A

39

AUTORES: F.J.Ramírez, J.T. López Navarrete
TÍTULO: NORMAL COORDINATE AND ROTATIONAL BARRIER
CALCULATIONS OF 1,2-DIHIDROXYBENZENE.
REF. REVISTA: *Vibrational Spectr.*, **4**, pág. 321-334. (1993). CLAVE A

40

AUTORES: J.T. López Navarrete, J.J.Quirante, F.J.Ramírez
TÍTULO: HARMONIC FORCE FIELD FOR AMINOACID L-GLUTAMINE
BY MNDO SEMIEMPIRICAL METHOD.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **294**, pág. 49-52. (1993). CLAVE A

41

AUTORES: F.J.Ramírez, J.T. López Navarrete
TÍTULO: CONFORMATIONAL AND VIBRATIONAL STUDY OF
1,2-DIHIDROXYBENZENE.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **293**, pág. 59-62. (1993). CLAVE A

42

AUTORES: V.Hernández, F.J.Ramírez, J.T. López Navarrete
TÍTULO: COMPARISON BETWEEN SEMIEMPIRICAL AND
EXPERIMENTAL FORCE FIELDS OF OLIGOTHIOPHENES
AS AN APPROACH FOR THE CALCULATIONS OF
THE VIBRATIONAL SPECTRUM OF THE POLYMER
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **294**, pág. 37-40. (1993). CLAVE A

43

AUTORES: V.Hernández, F.J.Ramírez, G.Zotti, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: RESONANCE RAMAN SPECTRA AND LATTICE DYNAMIC
CALCULATIONS OF PRISTINE AND DOPED
POLYCONJUGATED POLYFURAN.
REF. REVISTA: *Synth. Metals*, **57**, pág. 4467-4472. (1993). CLAVE A

44

AUTORES: V.Hernández, J.Soto, J.T. López Navarrete
TÍTULO: VIBRATIONAL SPECTRA AND LATTICE DYNAMICS
CALCULATIONS OF POLY(P-PHENYLENE): OLIGOMERS
AND POLYMER.
REF. REVISTA: *Synth. Metals*, **57**, pág. 4461-4466. (1993). CLAVE A

45

AUTORES: J.T. López Navarrete, F.J.Ramírez
TÍTULO: EFFECT OF THE SOLVENTS IN THE STRUCTURE OF
1,2-DIHIDROXYBENZENE.
REF. REVISTA: *Spectrochim. Acta*, **49A**, pág.1759-1767. (1993). CLAVE A

46

AUTORES: J.T. López Navarrete, J.J. Quirante, M.A.G. Aranda, V. Hernández, F.J. Ramírez
TÍTULO: CRYSTAL STRUCTURE, POLARIZED MICRO-RAMAN AND FTIR
SPECTRA, AND AB INITIO CALCULATIONS ON 1,2-DICYANOBENZENE
REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.* **97**, pág.10561-10569. (1993). CLAVE A

47

AUTORES: V.Hernández, F.J.Ramírez, T.F.Otero, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: AN INTERPRETATION OF THE VIBRATIONAL SPECTRA
OF INSULATING AND ELECTRICALLY CONDUCTING
POLY(3-METHYLTHIOPHENE) AIDED BY A THEORETICAL
DYNAMICAL MODEL.
REF. REVISTA: *J.Chem.Phys.*, **100**, pág.114-129. (1994). CLAVE A

48

AUTORES: J.T. López Navarrete, V.Hernández, F.J.Ramírez.
TÍTULO: INFRARED AND RAMAN SPECTRA OF L-ASPARTIC ACID
AND ISOTOPIC DERIVATIVES.
REF. REVISTA: *Biopolymers*, **34**, pág.1065-1077. (1994). CLAVE A

49

AUTORES: F.J.Ramírez, V.Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: TRANSFERABLE SEMIEMPIRICAL QUADRATIC FORCE
FIELDS: THE CASE OF POLYTHIOPHENE AND SHORTER OLIGOMERS.
REF. REVISTA: *J.Comp.Chem.*, **15**, pág.405-423. (1994). CLAVE A

50

AUTORES: J.T. López Navarrete, V.Hernández, G.Zotti, M.Veronelli, G.Zerbi.
TÍTULO: INFRARED SPECTRUM OF PHOTOEXCITED POLIFURAN.
REF. REVISTA: *Acta Polym.* **45**, pág.124-126. (1994). CLAVE A

51

AUTORES: V.Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: AB INITIO STUDY OF TORSIONAL POTENTIALS IN
2,2'-BITHIOPHENE AND 3,4'- AND 3,3'-DIMETHYL-2,2'-BITHIOPHENE
AS MODELS OF THE BACKBONE FLEXIBILITY IN POLYTHIOPHENE
AND POLY(3-METHYLTHIOPHENE).
REF. REVISTA: *J.Chem.Phys.*, **101**, pág.1369-1377. (1994). CLAVE A

52

AUTORES: J.T. López Navarrete, V.Hernández, F.J.Ramírez
TÍTULO: VIBRATIONAL SPECTRA OF GLUTAMIC ACID-¹⁵N AND GLUTAMIC ACID-D⁴.
REF. REVISTA: *J.Raman Spectrosc.*, **25**, pág.861-867. (1994). CLAVE A

53

AUTORES: J.T. López Navarrete, L.Bencivenni, F.Ramondo, V.Hernandez, F.J.Ramírez.
TÍTULO: STRUCTURAL AND SPECTROSCOPICAL STUDY OF
GLUTAMIC ACID IN THE NON-ZWITTERIONIC FORM.
REF. REVISTA: *J.Mol.Struct. (THEOCHEM)*, **330**, pág.261-266. (1995). CLAVE A

54

AUTORES: F.J.Ramírez, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: FORCE FIELD AND NORMAL COORDINATE CALCULATION OF GLUTAMIC ACID.
REF. REVISTA: *Spectrochim. Acta*, **51A**, pág.293-302. (1995). CLAVE A

55

AUTORES: V.Hernández, J.T. López Navarrete, G.Zotti, M.Veronelli, G.Zerbi.
TÍTULO: LATTICE DYNAMICS AND VIBRATIONAL SPECTRA OF
POLYFURAN: EFFECTIVE CONJUGATION COORDINATE
AND PHOTOEXCITED SPECTRUM.
REF. REVISTA: *Synth.Metals*, **69**, pág.391-392. (1995). CLAVE A

56

AUTORES: F.J.Ramírez, V.Hernández, G.Zotti, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: A SEMIEMPIRICAL APPROACH FOR THE CALCULATION
OF THE VIBRATIONAL SPECTRA OF CONDUCTING
POLYMERS: THE CASE OF POLYSELENOPHENE.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **348**, pág. 91-94. (1995). CLAVE A

57

AUTORES: J.T. López Navarrete, V.Hernández, F.J.Ramírez.
TÍTULO: VIBRATIONAL STUDY OF ASPARTIC ACID AND GLUTAMIC
ACID DIPEPTIDES.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **348**, pág. 249-252. (1995). CLAVE A

58

AUTORES: J.Casado, F.J.Ramírez, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: VIBRATIONAL SPECTRA AND ASSIGNMENT OF AMINO-ACID L-ASPARAGINE.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **349**, pág. 57-60. (1995). CLAVE A

59

AUTORES: J.Casado, J.T. López Navarrete, F.J.Ramírez.
TÍTULO: FORCE FIELD AND NORMAL COORDINATE
CALCULATIONS OF AMINO-ACID L-ASPARAGINE.
REF. REVISTA: *Spectrochim. Acta*, **51A**, pág. 2347-56. (1995). 0584-8539
CLAVE A

-
- 60
AUTORES: J.Casado, J.T. López Navarrete, F.J.Ramírez.
TÍTULO: INFRARED AND RAMAN SPECTRA OF L-ASPARAGINE AND L-ASPARAGINE-D₅ IN THE SOLID STATE.
REF. REVISTA: *J.Raman Spectrosc.* **26**, pág. 1003-1008. (1995). CLAVE A
-
- 61
AUTORES: J. Casado, J.T. López Navarrete, V. Hernández, F.J. Ramírez.
CAPITULO: VIBRATIONAL STUDY OF AMINO ACID L-ASPARAGINE IN AQUEOUS SOLUTION.
LIBRO: *Spectroscopy of Biological Molecules.*
EDITORES: J.C. Merlin, S. Turrell, J.P. Huvenne.
EDITORIAL: Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 1995.
ISBN: 0-7923-3628-3 CLAVE CL
-
- 62
AUTORES: V.Hernández, J.Casado, F.J.Ramírez, G.Zotti, Shu Hotta, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: DELOCALIZATION LENGTH, ELECTRONIC PROPERTIES AND VIBRATIONAL SPECTRA OF NEUTRAL α,α' -DIMETHYL END-CAPPED OLIGOTHIOPHENES.
REF. REVISTA: *Synth.Metals* **76**, pág. 277-80. (1996). CLAVE A
-
- 63
AUTORES: V.Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: SOLVENT EFFECTS ON ELECTRONIC PROPERTIES, GEOMETRIES AND INTERNAL ROTATION BARRIERS OF BITHIOPHENES. AND AB INITIO SCRF STUDY.
REF. REVISTA: *Synth.Metals* **76**, pág. 221-224. (1996). CLAVE A
-
- 64
AUTORES: V.Hernández, M.Veronelli, L.Favaretto, J.T. López Navarrete, G.Zerbi.
TÍTULO: π ELECTRON DELOCALIZATION IN PRISTINE POLIFURAN: FROM OLIGOMERS TO THE POLYMER.
REF. REVISTA: *Acta Polym.* **47**, pág. 62-65. (1996). CLAVE A
-
- 65
AUTORES: V.Hernández, J.Casado, F.J.Ramírez, G.Zotti, Shu Hotta, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: EFFECTIVE π ELECTRONS CONJUGATION IN NEUTRAL α,α' -END CAPPED OLIGOTHIOPHENES: A VIBRATIONAL SPECTROSCOPIC STUDY.
REF. REVISTA: *J.Chem.Phys.* **104**, pág. 9271-82. (1996). CLAVE A
-
- 66
AUTORES: V.Hernández, J.Casado, F.J.Ramírez, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: SCALED QUANTUM-MECHANICAL FORCE FIELD AND VIBRATIONAL SPECTRA OF 3-METHYLTHIOPHENE.
REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.* **100**, pág. 2907-14. (1996) CLAVE A
-

67

AUTORES: V.Hernández, J.Casado, F.J.Ramírez, L.J.Aleman, Shu Hotta, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: CONFORMATIONAL DISORDER AND MEAN CONJUGATION OF NEUTRAL α,α' -END CAPPED OLIGOTHIOPHENES IN SOLUTION: A FT-RAMAN AND FT-INFRARED SPECTROSCOPIC STUDY.
REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.* **100**, pág. 289-93. (1996). CLAVE A

68

AUTORES: J.T. López Navarrete, V. Hernández, F.J. Ramírez.
TÍTULO: SOLVENT EFFECTS ON THE STRUCTURE AND SPECTRA OF GLUTAMINE STUDIED BY THE SCRF THEORY.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **410-11**, pág. 353–356. (1997). CLAVE A

69

AUTORES: V. Hernández, F.J. Ramírez, J. Casado, F. Enríquez, J.J. Quirante, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: AB INITIO RHF/6–31G** THEORETICAL STUDY OF THIOPHENE DERIVATIVES: 2–METHYL AND 3–METHYLTHIOPHENE.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **410-11**, pág. 311–314. (1997). CLAVE A

70

AUTORES: J.T. López Navarrete, J. Casado, V. Hernández, F.J. Ramírez.
TÍTULO: EXPERIMENTAL AND THEORETICAL VIBRATIONAL STUDIES OF THE AMINO ACID L–ASPARAGINE IN SOLUTION.
REF. REVISTA: *J. Raman Spectrosc.*, **28**, pág. 501–509. (1997). CLAVE A

71

AUTORES: V. Hernández, A. Berlin, G. Zotti, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: INFRARED AND RAMAN SPECTRA OF TWO WELL–BARRIER WELL 1,2–DI(α,α' –OLIGOTHIENYL) ETHANES.
REF. REVISTA: *J. Raman Spectrosc.*, **28**, pág. 855–865. (1997). CLAVE A

72

AUTORES: J.T. López Navarrete, J. Casado, V. Hernández, F.J. Ramírez.
TÍTULO: AB INITIO SELF–CONSISTENT REACTION FIELD CALCULATIONS ON AMINO ACIDS: ASPARAGINE ZWITTERIONS IN POLAR MEDIUM AND GAS PHASE.
REF. REVISTA: *Theor. Chem. Acc.*, **98**, pág. 5–15. (1997). CLAVE A

73

AUTORES: J. Casado, F.J. Ramírez, S. Hotta, J.T. López Navarrete, V. Hernández.
TÍTULO: VIBRATIONAL SPECTROSCOPY STUDY OF DOPING INDUCED CHARGED DEFECTS IN A SERIES OF α,α' –DIMETHYL END–CAPPED OLIGOTHIOPHENES.
REF. REVISTA: *Synth. Metals*, **84**, pág. 571–572. (1997). CLAVE A

74

AUTORES: V. Hernández, A. Berlin, G. Zotti, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: VIBRATIONAL ANALYSIS AS A FUNCTION OF THE CHAIN-LENGTH OF WELL-BARRIER-WELL Π -CONJUGATED THIOPHENE-BASED OLIGOMERS.
REF. REVISTA: *Synth. Metals*, **84**, pág. 591–592. (1997). CLAVE A

75

AUTORES: J. Casado, V. Hernández, F.J. Ramírez, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: A THEORETICAL INVESTIGATION OF α,α' -DIMETHYL END-CAPPED OLIGOTHIOPHENES; STRUCTURES, VIBRATIONAL SPECTRA AND CONJUGATIONAL DEFECTS.
REF. REVISTA: *Synth. Metals*, **89**, pág. 159–160. (1997). CLAVE A

76

AUTORES: J.T. López Navarrete, V. Hernández, F.J. Ramírez.
CAPÍTULO: AB INITIO STUDY OF ASPARTIC ACID CONFORMATIONS IN A CONTINUUM SOLVENT MODEL.
LIBRO: *Spectroscopy of Biological Molecules: Modern Trends*.
EDITORES: P. Carmona, R. Navarro, A. Hernanz.
EDITORIAL: Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 1997.
ISBN: 0-7923-4685-8 CLAVE CL

77

AUTORES: F.J. Ramírez, M.A. Medina, A.J. Ruiz-Chica, J.T. López Navarrete, F. Sánchez-Jiménez.
CAPÍTULO: A RAMAN SPECTROSCOPY APPROACH TO THE INTERACTION BETWEEN CHLORPHENIRAMINE AND DNA
LIBRO: *Spectroscopy of Biological Molecules: Modern Trends*.
EDITORES: P. Carmona, R. Navarro, A. Hernanz.
EDITORIAL: Kluwer Academic Publishers, Netherlands, 1997.
ISBN: 0-7923-4685-8 CLAVE CL

78

AUTORES: M.A. Medina, F.J. Ramírez, A.J. Ruiz-Chica, T. Chavarría, J.T. López Navarrete, F. Sánchez-Jiménez.
TÍTULO: DNA-CHLORPHENIRAMINE INTERACTION STUDIED BY SPECTROSCOPIC TECHNIQUES
REF. REVISTA: *Biochim. Biophys. Acta.*, **1379**, pág. 129–133. (1998). CLAVE A

79

AUTORES: F.J. Ramírez, M.A.G. Aranda, V. Hernández, J. Casado, S. Hotta, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: TEMPERATURE DEPENDENT INFRARED SPECTROSCOPIC AND CRYSTALLOGRAPHIC STUDY OF α,α' -DIMETHYLOLIGOTHIOPHENES IN NEUTRAL FORM.
REF. REVISTA: *J. Chem. Phys.*, **109**, pág. 1920–1929. (1998). CLAVE A

80

AUTORES:

V. Hernández, S. Hotta, J.T. López Navarrete.

TÍTULO:

VIBRATIONAL SPECTROSCOPIC STUDY OF 5,5"-BIS(DICYANOMETHYLENE)-5,5"-DIHYDRO- Δ 2,2':5",2" TERTHIOPHE BEARING A HETEROQUINONOID STRUCTURE AS A MODEL OF DOPED POLYTHIOPHENE.

REF. REVISTA:

J. Chem. Phys., **109**, pág. 2543-2548 (1998).

CLAVE A

81

AUTORES:

J. Casado, V. Hernández, S. Hotta, J.T. López Navarrete.

TÍTULO:

FT-RAMAN STUDIES OF CHARGED DEFECTS CREATED ON METHYL END-CAPPED OLIGOTHIOPHENES BY DOPING WITH NOBF₄.

REF. REVISTA:

Adv. Mat., **10**, pág. 1458-1461 (1998).

CLAVE A

82

AUTORES:

J. Casado, T.F. Otero, S. Hotta, V. Hernández, F.J. Ramírez, J.T. López Navarrete.

TÍTULO:

ELECTROCHEMICAL DOPING IN A SERIES OF α,α' -DIMETHYL END-CAPPED OLIGOTHIENYLS. AN FT-RAMAN CONFIRMATION OF A RADICAL CATION GENERATION.

REF. REVISTA:

Opt. Mat., **9**, pág. 82-87. (1998).

CLAVE A

83

AUTORES:

J. Casado, M. Bengoechea, J.T. López Navarrete, T.F. Otero.

TÍTULO:

"IN SITU" SPECTROELECTROCHEMICAL STUDY OF A SERIES OF α,α' -DIMETHYL END-CAPPED OLIGOTHIOPHENE FILMS.

REF. REVISTA:

Synth. Met., **95**, pág. 93-100. (1998).

CLAVE A

84

AUTORES:

V. Hernández, Y. Kanemitsu, J.T. López Navarrete.

TÍTULO:

INFRARED AND RAMAN SPECTRA OF A Π -CONJUGATED METHYLENE-BRIDGE OLIGOTHIOPHENE.

REF. REVISTA:

J. Raman Spectrosc., **29**, pág. 617-625. (1998). 0377-0486

CLAVE A

85

AUTORES:

J. Casado, V. Hernández, S. Hotta, J.T. López Navarrete.

TÍTULO:

VIBRATIONAL SPECTRA OF CHARGED DEFECTS IN A SERIES OF α,α' -DIMETHYL END-CAPPED OLIGOTHIOPHENES INDUCED BY CHEMICAL DOPING WITH IODINE.

REF. REVISTA:

J. Chem. Phys., **109**, pág. 10419-10429. (1998).

CLAVE A

86

AUTORES: J. Casado, S. Hotta, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: FT-IR AND FT-RAMAN SPECTRA OF A SERIES OF OXIDIZED α,α' -DIETHYL END-CAPPED OLIGOTHIENYLS: A SPECTROSCOPIC STUDY OF CONJUGATIONAL MODEL DEFECTS.
REF. REVISTA: *Opt. Mat.*, **12**, pág. 321-325 (1999).
LIBRO: *Materials, Physics and Devices for Molecular Electronics and Photonics*.
EDITORES: J. Ziss, F. Garnier.
EDITORIAL: Elsevier, Lausanne, 1999.
ISBN: 0-444-20519-5 CLAVE A, CL

87

AUTORES: J. Casado, S. Hotta, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: VIBRATIONAL SPECTROSCOPIC STUDY OF A SERIES OF α,α' -DIETHYL END-CAPPED OLIGOTHIOPHENES WITH DIFFERENT CHAIN LENGTHS IN NEUTRAL STATE.
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem.*, **103**, pág. 816-822. (1999). CLAVE A, CL

88

AUTORES: J. Casado, V. Hernández, F.J. Ramírez, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: AB INITIO HF AND DFT CALCULATIONS OF GEOMETRIC STRUCTURES AND VIBRATIONAL SPECTRA OF ELECTRICALLY CONDUCTING DOPED OLIGOTHIOPHENES.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, **463**, pág. 211-216. (1999). CLAVE A

89

AUTORES: V. Hernández, J. Casado, S. Hotta, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: VIBRATIONAL AND ELECTRONIC SPECTROSCOPIC STUDY OF TWO OLIGOTHIOPHENE MATERIALS BEARING A HETEROQUINOID STRUCTURE.
REF. REVISTA: *Synth.Met.*, **101**, pág. 549-550. (1999). CLAVE A

90

AUTORES: V. Hernández, J. Casado, Y. Kanemitsu, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: INFRARED AND RAMAN SPECTRA OF A WELL-BARRIER-WELL 1,2-DI(α,α' -BITHENYL)VINYLENE.
REF. REVISTA: *Synth.Met.*, **101**, pág. 548. (1999). CLAVE A

91

AUTORES: V. Hernández, J. Casado, L. Favaretto, G. Distefano, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: VIBRATIONAL SPECTRA AND AB INITIO DFT CALCULATIONS OF 3,3'-, 3,4'- AND 4,4'-DIMETHYL-2,2'-BITHIOPHENE.
REF. REVISTA: *Synth.Met.*, **101**, pág. 590-591. (1999). CLAVE A

92

AUTORES:

J. Casado, V. Hernández, Y. Kanemitsu, J.T. López Navarrete.

TÍTULO:

VIBRATIONAL STUDY OF A WELL–BARRIER–WELL THIOPHENE-BASED OLIGOMER IN RELATION TO THE EFFECTIVE π -CONJUGATION LENGTH.

REF. REVISTA:

J. Chem. Phys., **110**, pág. 6507–6515. (1999).

CLAVE A

93

AUTORES:

A. Bongini, G. Barbarella, M. Zambianchi, V. Hernandez, J.T. Lopez Navarrete.

TÍTULO:

RAMAN SPECTRA AND CONFORMATIONAL PROPERTIES OF HEXYL AND METHYLSULPHANYL SUBSTITUTED OLIGOTHIOPHENES.

REF. REVISTA:

Synth. Metals, **108**, pág. 27-31. (2000).

CLAVE A

94

AUTORES:

J.T. López Navarrete, J. Casado, H. Muguruma, S. Hotta, V. Hernández.

TÍTULO:

VIBRATIONAL SPECTRA OF CHARGED DEFECTS IN A SERIES OF α,α' -BIS(AMINOMETHYL) END-CAPPED OLIGOTHIOPHENES INDUCED BY CHEMICAL DOPING WITH IODINE.

REF. REVISTA:

J. Mol. Struct., **521**, pág. 239–247. (2000).

CLAVE A

95

AUTORES:

V. Hernández, J. Casado, J.T. López Navarrete.

TÍTULO:

DENSITY FUNCTIONAL STUDY ON THE STRUCTURES AND VIBRATIONAL SPECTRA OF THE RADICAL CATION AND DICATION OF α,α' -BIS(AMINOMETHYL) QUATERTHIOPHENE.

REF. REVISTA:

J. Mol. Struct., **521**, pág. 249-260. (2000).

CLAVE A

96

AUTORES:

V. Hernández, H. Muguruma, S. Hotta, J. Casado, J.T. López Navarrete.

TÍTULO:

A COMBINED SPECTROSCOPIC AND THEORETICAL STUDY OF A SERIES OF AMINOMETHYL END-CAPPED OLIGOTHIOPHENES WITH POTENTIAL APPLICATIONS IN THIN FILM DEVICES.

REF. REVISTA:

J. Phys. Chem., **104**, pág. 735-740. (2000).

CLAVE A

97

AUTORES:

V. Hernández, S. Calvo Losada, J. Casado, H. Higuchi, J.T. López Navarrete.

TÍTULO:

COMBINED THEORETICAL AND VIBRATIONAL STUDY OF DIHEXYLBITHIENOQUINONOID DERIVATIVES WITH REGIOREGULAR HEAD-TO-HEAD, HEAD-TO-TAIL AND TAIL-TO-TAIL ORIENTATIONS.

REF. REVISTA:

J. Phys. Chem., **104**, pág. 661-672. (2000).

CLAVE A

98

AUTORES: J. Casado, H. Muguruma, S. Hotta, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: COMPUESTOS OLIGOMÉRICOS PARA LÁMINAS DELGADAS. ESTUDIO DE SUS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS PORESPECTROSCOPÍARAMAN
REF. REVISTA: *Bol. Soc. Cerám. Vidrio.*, **39**, pág. 397-400. (2000). CLAVE A

99

AUTORES: J. Casado, V. Hernández, Y. Kanemitsu, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: INFRARED AND RAMAN SPECTRA OF A NEW RADICAL CATION CHARGED DEFECT CREATED ON A WELL-BARRIER-WELL THIOPHENE BASED OLIGOMER.
REF. REVISTA: *J. Raman Spectrosc.*, **31**, pág. 565-570. (2000). CLAVE A

100

AUTORES: V. Hernández, J. Casado, F. Effenberger, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: ANALYSIS OF THE INTRAMOLECULAR CHARGE TRANSFER IN DONOR-ACCEPTOR α,α' -SUBSTITUTED OLIGOTHIOPHENES FROM THEIR VIBRATIONAL SPECTRA.
REF. REVISTA: *J. Chem. Phys.*, **112**, pág. 5105-5112. (2000). CLAVE A

101

AUTORES: J. Casado, J.J. Maraver Puig, V. Hernández, G. Zotti, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: SPECTROELECTROCHEMICAL RAMAN STUDY OF A NOVEL WELL-BARRIER-WELL VINYLENE-BRIDGE-OCTITHIOPHENE OLIGOMER: AN ANALYSIS OF THE CONJUGATIONAL LENGTH AND OF THE ELECTRONIC DEFECTS CREATED UPON DOPING.
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem.*, **104**, pág. 10656-10661. (2000). CLAVE A

102

AUTORES: J. Casado, H.E. Katz, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
CAPÍTULO: SPECTROELECTROCHEMICAL RAMAN STUDY OF TWO α,α' -END CAPPED SEXITHIOPHENES: THE EFFECT OF THE INTRODUCTION OF A POLARIZABLE SULFUR ATOM IN THE SIDE CHAIN.
LIBRO: *Organic Electronic and Photonic Materials and Devices*.
EDITOR: Steven C. Moss
EDITORIAL: Material Research Society, Warrendale (USA), 2001.
ISBN: 1-55899-570-6 CLAVE CL

103

AUTORES: J. Serrano, J. Casado, V. Hernández, L. Favaretto, G. Distefano, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: VIBRATIONAL AND THEORETICAL DFT STUDY OF TWO REGIOREGULAR METHYL-DISUBSTITUTED BITHIOPHENES.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.*, **563-564**, pág. 539-544. (2001). CLAVE A

104

AUTORES: V. Hernández, J. Casado, F. Effenberger, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: INTRAMOLECULAR CHARGE TRANSFER IN PUSH-PULL OLIGOTHIOPHENES FROM THEIR VIBRATIONAL SPECTRA.
REF. REVISTA: *Synth.Met.*, **119**, pág. 551-552. (2001). CLAVE A

105

AUTORES: J. Casado, V. Hernández, S.Hotta, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: SPECTROELECTROCHEMICAL RAMAN STUDY OF A NEW SERIES OF THIOPHENE/PHENYLENE CO-OLIGOMERS.
REF. REVISTA: *Synth.Met.*, **119**, pág. 305-306. (2001). CLAVE A

106

AUTORES: V. Hernández, J. Casado, H. Higuchi, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: THEORETICAL AND VIBRATIONAL STUDY OF ELECTRON-ACCEPTOR OLIGOTHIENOQUINONONIDS WITH WELL DEFINED SUBSTITUTION PATTERNS.
REF. REVISTA: *Synth.Met.*, **119**, pág. 553-554. (2001). CLAVE A

107

AUTORES: J.T. López Navarrete.
CAPÍTULO: ESTRUCTURAS Y PROPIEDADES ÓPTICAS DE MATERIALES POLICONJUGADOS A PARTIR DE SUS ESPECTROS VIBRACIONALES: ESPECTROSCOPIA INFRARROJA Y RAMAN DE OLIGOTIOPHENOS.
LIBRO: *Los materiales moleculares en España en el umbral del siglo XXI.*
EDITORES: P. Vázquez, T. Torres, N. Martín.
EDITORIAL: UAM ediciones, Madrid, 2001.
ISBN: 84-7477-787-9 CLAVE CL

108

AUTORES: M. González, J.L. Segura, C. Seone, N. Martín, J. Garín, J. Orduna, R. Alcalá, B. Villacampa, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: THETRATHIAFULVALENE DERIVATIVES AS NLO-PHORES: SYNTHESIS, ELECTROCHEMISTRY, RAMAN SPECTROSCOPY, THEORETICAL CALCULATIONS, AND NLO PROPERTIES OF NOVEL TTF-DERIVED DONOR-PI-ACCEPTOR DYADS.
REF. REVISTA: *J. Org. Chem.*, **66**, pág. 8872-8882. (2001). CLAVE A

109

AUTORES: J. Casado, H.E. Katz, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: SPECTROELECTROCHEMICAL RAMAN STUDY OF TWO END-CAPPED SEXITHIOPHENES WITH APPLICATIONS AS ELECTROACTIVE MOLECULAR MATERIALS.
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. B*, **106**, pág. 2488-2496. (2002). CLAVE A

110

AUTORES:

J. Casado, H.E. Katz, V. Hernández, J.T. López Navarrete.

TÍTULO:

INFRARED SPECTRA OF TWO SEXITHIOPHENES IN NEUTRAL AND DOPED STATES: A THEORETICAL AND SPECTROSCOPIC STUDY.

REF. REVISTA:

Vibr. Spectrosc., **30**, pág. 175–189. (2002).

CLAVE A

111

AUTORES:

J. Casado, L.L. Miller, K.R. Mann, T.M. Pappenfus, Y. Kanemitsu, E. Ortí, P.M. Viruela, R. Pou-Amérigo, V. Hernández, J.T. López Navarrete.

TÍTULO:

COMBINED SPECTROELECTROCHEMICAL AND THEORETICAL STUDY OF A VINYLENE-BRIDGED SEXITHIOPHENE COOLIGOMER: ANALYSIS OF THE π -ELECTRON DELOCALIZATION AND OF THE ELECTRONIC DEFECTS GENERATED UPON DOPING.

REF. REVISTA:

J. Phys. Chem. B, **106**, pág. 3872–3881. (2002).

CLAVE A

112

AUTORES:

J. Casado, L.L. Miller, K.R. Mann, T.M. Pappenfus, V. Hernández, J.T. López Navarrete.

TÍTULO:

EXPERIMENTAL AND THEORETICAL STUDY OF THE INFRARED AND RAMAN SPECTRA OF A SUBSTITUTED SEXITHIOPHENE IN FIVE OXIDATION STATES.

REF. REVISTA:

J. Phys. Chem. B, **106**, pág. 3597–3605. (2002).

CLAVE A

113

AUTORES:

C. Moreno Castro, M. C. Ruiz Delgado, V. Hernandez, S. Hotta, J. Casado, J.T. López Navarrete.

TÍTULO:

EFFICIENCY OF THE π - CONJUGATION IN A NOVEL FAMILY OF α,α' -BISPHENYL END-CAPPED OLIGOTHIOPHENES BY MEANS OF RAMAN SPECTROSCOPY.

REF. REVISTA:

J. Chem. Phys. **116**, pág. 10419–10427. (2002).

CLAVE A

114

AUTORES:

C. Moreno Castro, M. C. Ruiz Delgado, V. Hernandez, S. Shirota, J. Casado, J.T. López Navarrete.

TÍTULO:

VIBRATIONAL SPECTROSCOPIC FEATURES OF A NOVEL FAMILY OF AMORPHOUS MOLECULAR MATERIALS CONTAINING AN OLIGOTHIOPHENE MOIETY AS COLOR-TUNABLE EMITTING MATERIALS.

REF. REVISTA:

J. Phys. Chem. B, **106**, pág. 7163–7170. (2002).

CLAVE A

115

AUTORES:

J. Casado, L.L. Miller, K.R. Mann, T.M. Pappenfus, H. Higuchi, E. Ortí, B. Milián, R. Pou-Amérigo, V. Hernández, J.T. López Navarrete.

TÍTULO:

QUINONOID OLIGOTHIOPHENES AS ELECTRON-DONOR AND ELECTRON-ACCEPTOR ACTIVE MOLECULAR MATERIALS. A JOINT SPECTROELECTROCHEMICAL AND THEORETICAL STUDY.

REF. REVISTA:

J. Am. Chem. Soc. **124**, pág. 12380–12388. (2002).

CLAVE A

116

AUTORES: C. Moreno Castro, M. C. Ruiz Delgado, J. Casado, S. Hotta, V. Hernández, J.T. López Navarrete.

CAPITULO: RAMAN SPECTRA OF A NOVEL FAMILY OF THIOPHENE/PHENYLENE CO-OLIGOMERS IN NEUTRAL AND DOPED STATES.

LIBRO: *Proceedings of the XVIII International Conference on Raman Spectroscopy.*

EDITORES: J. Mink, G. Jalsovszki, G. Keresztury

EDITORIAL: John Wiley and Sons Ltd., Chichester 2002. Pág. 647-648. (2002)

ISBN: 0 471 49189 6 CLAVE CL

117

AUTORES: J. Casado, T.M. Pappenfus, L.L. Miller, K.R. Mann, E. Ortì, P.M. Viruela, R. Pou-Amérigo, V. Hernández, J.T. López Navarrete.

TÍTULO: NITRO-FUNCTIONALIZED OLIGOTHIOPHENES AS A NOVEL TYPE OF ELECTROACTIVE MOLECULAR MATERIALS. A SPECTROSCOPIC, ELECTROCHEMICAL AND COMPUTATIONAL STUDY.

REF. REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.* **125**, pág. 2524-2534. (2003). CLAVE A

118

AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J. Casado, J.T. López Navarrete, J.-M. Raimundo, P. Blanchard, J. Roncalí.

TÍTULO: VIBRATIONAL STUDY OF PUSH-PULL CHROMOPHORES FOR SECOND-ORDER NONLINEAR OPTICS DERIVED FROM RIGIDIFIED THIOPHENE π -CONJUGATING SPACERS.

REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.* **651-653**, pág. 151-158. (2003). CLAVE A

119

AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J. Casado, J.T. López Navarrete, J.-M. Raimundo, P. Blanchard, J. Roncalí.

TÍTULO: VIBRATIONAL AND QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF PUSH-PULL CHROMOPHORES FOR SECOND ORDER NONLINEAR OPTICS DERIVED FROM RIGIDIFIED THIOPHENE-BASED π -CONJUGATING SPACERS.

REF. REVISTA: *Chem. Eur.J.* **9**, pág. 3670-3682. (2003). CLAVE A

120

AUTORES: J. Casado, M.C. Ruiz Delgado, Y. Shirota, V. Hernández, J.T. López Navarrete.

TÍTULO: COMPUTATION AND SPECTROELECTROCHEMISTRY AS COMPLEMENTARY TOOLS FOR THE STUDY OF ELECTROCHEMICALLY INDUCED CHARGED DEFECTS IN 4-[BIS(4-METHYLPHENYL)AMINO] PHENYL OLIGOTHIOPHENES AS MODEL SYSTEMS FOR HOLE-TRANSPORTING MATERIALS.

REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. B.* **107**, pág. 2637-2644. (2003). CLAVE A

121

AUTORES: J. Casado, M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, B. Milián, P.M. Viruela, E. Ortí, T.M. Pappenfus, K.R. Mann.
TÍTULO: UV-VIS, IR, RAMAN AND THEORETICAL CHARACTERIZATION OF A NOVEL TYPE OF QUINOID OLIGOTHIENYLENE MOLECULAR MATERIAL.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.* **651-653**, pág.665-673. (2003). CLAVE A

122

AUTORES: J. Casado, R.G. Hicks, V. Hernández, D.J.T. Myles, M. C. Ruiz Delgado, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: INFRARED AND RAMAN FEATURES OF A SERIES OF α,ω -BIS(ARYLTHIO)OLIGOTHIOPHENES AS MOLECULAR WIRES. A π -ELECTRON DELOCALIZATION EFFICIENCY STUDY.
REF. REVISTA: *J. Chem. Phys.* **118(4)**, pág. 1912-1920. (2003). CLAVE A

123

AUTORES: B. Milián, E. Ortí, V. Hernández, J.T. López Navarrete, Tetsuo Otsubo.
TÍTULO: SPECTROSCOPIC AND THEORETICAL STUDY OF PUSH-PULL CHROMOPHORES CONTAINING THIOPHENE-BASED QUINONOID STRUCTURES AS ELECTRON SPACERS.
REF. REVISTA: *J.Phys. Chem. B.* **107**, pág. 12175-12183. (2003). CLAVE A

124

AUTORES: P.M. Viruela, R. Viruela, E. Ortí, J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: THEORETICAL DESCRIPTION OF THE RAMAN SPECTRUM OF A VINYLENE-BRIDGED QUATERTHIOPHENE OLIGOMER.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.* **651-653**, pág. 657-664. (2003). CLAVE A

125

AUTORES: J. Casado, J. J. Quirante. V. Hernández, J.T. López Navarrete, K. Takimiya, T. Otsubo.
TÍTULO: A RAMAN AND COMPUTATIONAL STUDY OF TWO DITHIENYL NAPHTHODITHIOPHENES: SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF NEW POLYMERS SHOWING LOW-BAND GAP OPTICAL AND ELECTRO-ACTIVES FEATURES.
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. B.* **108**, pág. 7611-7619. (2004). CLAVE A

126

AUTORES: J. Casado, V. Hernández, O.-K. Kim, J.M. Lehn, J. T. López Navarrete, S. Delgado Ledesma, R. Ponce Ortiz, M. C. Ruiz Delgado, Y. Vida, E. Pérez-Inestrosa.
TÍTULO: VIBRATIONAL AND QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF NONLINEAR OPTICAL CHROMOPHORES CONTAINING DITHIENOTHIOPHENE AS THE ELECTRON RELAY.
REF. REVISTA: *Chem. Eur. J.* **10**, pág. 3805-3816. (2004). CLAVE A

127

AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, G. Fuhrmann, P. Bäuerle.
TÍTULO: COMBINED RAMAN AND COMPUTATIONAL STUDY OF A NOVEL SERIES OF CAROCYCLIC π -CONJUGATED DIACETYLENE-BRIDGED α -LINKED OLIGOTHIOPHENES.
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. B* **108(10)**, pág. 3158-3167. (2004). CLAVE A

128

AUTORES: J.Casado, T.M. Pappenfus, K.R. Mann, E. Ortí, P.M. Viruela, B. Milián, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: SPECTROSCOPIC AND THEORETICAL STUDY OF THE MOLECULAR AND ELECTRONIC STRUCTURES OF A TERTHIOPHTHENE-BASED QUINODIMETHANE.
REF. REVISTA: *Chem. Phys. Chem.* **5**, pág. 529-539. (2004). CLAVE A

129

AUTORES: J.L. Delgado, P. de la Cruz, F. Langa, A. Urbina, J. Casado, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: MICROWAVE-ASSITED SIDEWALL FUNCTIONALIZATIO OF SINGLE-WALL CARBON NANOTUBES BY DIELS-ALDER CYCLOADDITION.
REF. REVISTA: *Chem. Comm.*, pág 1734-1735. (2004). CLAVE A

130

AUTORES: J. Casado, T.M. Pappenfus, K.R. Mann, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: EXPLORATION OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF DENDRIMERICLIKE ACETYLENE-BRIDGED OLIGOTHIOPHENES BY CORRELATING RAMAN SPECTROSCOPY, ELECTROCHEMISTRY AND THEORY.
REF. REVISTA: *J. Chem. Phys.* **120**, pág. 11874-11881. (2004). CLAVE A

131

AUTORES: J. Casado, V. Hernández, R. Ponce Ortiz, M.C. Ruiz Delgado, J.T. López Navarrete, G. Fuhrmann, P. Bauerle.
TÍTULO: APPLICATION OF RAMAN SPECTROSCOPY AND QUANTUM CHEMISTRY FOR FEATURING THE STRUCTURE OF POSITIVELY CHARGED SPEDIES IN MACROCYCLIC π -CONJUGATED DIACETYLENE-BRIDGED OLIGOTHIOTHENES.
REF. REVISTA: *J. Raman Spectrosc.* **35**, pág. 592-599. (2004). CLAVE A

132

AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, S. Tanaka, Y. Yamashita.
TÍTULO: COMBINED SPECTROSCOPIC AND THEORETICAL STUDY OF NARROW BAND GAP HETEROCYCLIC CO-OLIGOMERS CONTAINING ALTERNATING AROMATIC AND σ -QUINOID ACCEPTOR UNITS.
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. B* **108**, pág. 2516-2526. (2004). CLAVE A

133

AUTORES: J. Casado, M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, S. Hotta, F. Carrique, J.R. Ramos-Barrado.
TÍTULO: STUDY OF THE AC CONDUCTIVITY OF α , α' -DIMETHYL SEXITHIOPHENE IN PRISTINE AND DOPED STATES.
REF. REVISTA: *J. Non. Cryst. Sol.* **342**, pág. 146-151. (2004). CLAVE A

134

AUTORES: R. Ponce Ortiz, M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, V. Hernández, O.-K. Kim, H.Y. Woo, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: ELECTRONIC MODULATION OF DITHIENOTHIOPHENE (DTT) AS π -CENTER OF D- π -D CHROMOPHORES ON OPTICAL AND REDOX PROPERTIES: ANALYSIS BY UV-VIS-NIR AND RAMAN SPECTROSCOPIES COMBINED WITH ELECTROCHEMISTRY AND QUANTUM CHEMICAL DFT CALCULATIONS.
REF. REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.* **126**, p. 13363-13376. (2004). CLAVE A

135

AUTORES: J. Casado, R. Ponce Ortiz, J.T. López Navarrete, S. Ito, N. Morita.
TÍTULO: A PRACTICAL SPECTROSCOPIC AND THEORETICAL APPROACH TO STUDY THE ELECTROCHROMISM IN MOLECULAR-BASED MATERIALS: THE CASE OF A FAMILY OF DENDRIMERLIKE POLY(6-AZULENYLETHENYL)BENZENES.
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. B.* **108**, pág. 18463-18471. (2004). CLAVE A

136

AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J. Casado, J.T. López Navarrete, J.-M. Raimundo, P. Blanchard, J. Roncali
TÍTULO: QUANTUM CHEMICAL DFT AND SPECTROSCOPIC STUDY OF A PUSH-PULL CHROMOPHORE FOR SECOND-ORDER NONLINEAR OPTICS CONTAINING BITHIOPHENE AS THE ELECTRON RELAY.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, **709**, pág. 187-193. (2004). CLAVE A

137

AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, F.J. Ramírez, V. Hernández, J. Casado, F. Enríquez, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: VIBRATIONAL DYNAMICS STUDY OF THE EFFECT OF THE SUBSTITUENTS ON THE π -CONJUGATION OF DIFFERENT BITHIOPHENE MOLECULES.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.* **744-747**, pág. 393-401. (2005). CLAVE A

138

AUTORES: J. Casado, G. Zotti, A. Berlin, V. Hernández, R. Ponce, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: COMBINED THEORETICAL AND SPECTROSCOPIC RAMAN STUDY OF 3,4-ETHYLENEDIOXY AND S,S-DIOXIDE SUBSTITUTED TERTHIOPHENES AND THEIR PARENT POLYMERS.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.* **744-747**, pág. 551-556. (2005). CLAVE A

139

AUTORES: V. Cuberos Guzmán, R. Ponce Ortiz, M.C. Ruiz Delgado, R. Azumi, R.T. Oakley, J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: FT-RAMAN SPECTROSCOPIC STUDY, AIDED BY QUANTUM CHEMICAL DFT CALCULATIONS, OF A SERIES OF OLIGOTHIOPHENES END-CAPPED BY NITRILES.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.* **744-747**, pág. 403-409. (2005). CLAVE A

140

AUTORES: R. Ponce Ortiz, R. Malavé Osuna, M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, S.A. Jenekhe, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: SPECTROSCOPIC AND DFT STUDIES OF DONOR-ACCEPTOR MOLECULES CONTAINING PHENYLQUINOLINE AND PHENOTHIAZINE MOIETIES IN VARIOUS REDOX STATES.
REF. REVISTA: *Int. J. Quant. Chem.* **104**, pág. 635-644. (2005). CLAVE A

141

AUTORES: J. Casado, R. Ponce Ortiz, M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, J.-M. Raimundo, P. Blanchard, M. Allain, J. Roncali.
TÍTULO: ALTERNATED QUINOID/AROMATIC UNITS IN TERTHIOPHENES BUILDING BLOCKS FOR ELECTROACTIVE NARROW BAND GAP POLYMERS. EXTENDED SPECTROSCOPIC, SOLID STATE, ELECTROCHEMICAL, AND THEORETICAL STUDY.
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. B.* **109**, pág. 16616-16627. (2005). CLAVE A

142

AUTORES: J. Casado, V. Hernández, M.C. Ruiz Delgado, R. Ponce Ortiz, J.T. López Navarrete, A. Facchetti, T.J. Marks.
TÍTULO: INCISIVE STRUCTURE-SPECTROSCOPIC CORRELATION IN OLIGOTHIOPHENES FUNCTIONALIZED WITH (\pm) INDUCTIVE /MESOMERIC FLUORINE GROUPS: JOINT RAMAN AND DFT STUDY.
REF. REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.* **127**, pág. 13364-13372. (2005). CLAVE A

143

AUTORES: J. Casado, M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, C. Parejo, F. Fernández-Lázaro, Á. Sastre-Santos, F. Wudl.
TÍTULO: SYNTHESIS, SPECTROSCOPY AND QUANTUM CHEMICAL DFT STUDIES ON NEW PLEIADENE-BASED MATERIALS.
REF. REVISTA: *Synth. Met.*, **153**, pág. 245-248. (2005). CLAVE A

144

AUTORES: J. Casado, R. Réau, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: COMBINED RAMAN, ELECTROCHEMICAL AND DFT STUDIES ON A SERIES OF α , α' -THIOPHENE-PHOSPHOLE OLIGOMERS AND THEIR CORRESPONDING POLYMERS.
REF. REVISTA: *Synth. Met.*, **153**, pág. 249-252. (2005). CLAVE A

145

AUTORES: R. Andreu, M.J. Blesa, L. Carrasquer, J. Garín, J. Orduna, B. Villacampa, R. Alcalá, J. Casado, M.C. Ruiz Delgado, J.T. López Navarrete, M. Allain.
TÍTULO: TUNING FIRST MOLECULAR HYPERPOLARIZABILITIES THROUGH THE USE OF PROAROMATIC SPACERS.
REF. REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.* **127**, pág. 8835-8845. (2005). CLAVE A

146

AUTORES: E. Orti, P. M. Viruela, R. Viruela, F. Effenberger, V. Hernández, J. T. López Navarrete.
TÍTULO: RAMAN AND THEORETICAL STUDY OF THE SOLVENT EFFECTS ON THE SIZEABLE INTRAMOLECULAR CHARGE TRANSFER IN THE PUSH-PULL 5-(DIMETHYLAMINO)-5'-NITRO-2,2'-BITHIOPHENE.
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. A.* 109, pág. 8724-8731. (2005). CLAVE A

147

AUTORES: R. Malavé Osuna, R. Ponce Ortiz, M. C. Ruiz Delgado, Y. Sakamoto, T. Suzuki, V. Hernández, J. T. López Navarrete.
TÍTULO: SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF THREE NOVEL PERFLUORO-OLIGOTHIOPHENES RANGING IN LENGTH FROM THE TRIMER TO THE PENTAMER.
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. B.* **109**, pág. 20737-20745. (2005). CLAVE A

148

AUTORES: A. Berlin, S. Grimoldi, G. Zotti, R. Malavé Osuna, M. C. Ruiz Delgado, R. Ponce Ortiz, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete.
TÍTULO: SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF A NOVEL TERTHIOPHENE-BASED QUINODIMETHANE BEARING A 3,4-ETHYLENEDIOXYTHIOPHENE CENTRAL UNIT.
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. B.* **109**, pág. 22308-22318. (2005). CLAVE A

149

AUTORES: J. Casado, R. Ponce Ortiz, M.C. Ruiz Delgado, R. Azumi, R.T. Oakley, V. Hernández, J. T. López Navarrete.
TÍTULO: MULTIDISCIPLINARY PHYSICOCHEMICAL ANALYSIS OF OLIGOTHIOPHENES END-CAPPED BY NITRILES: ELECTROCHEMISTRY, UV-VIS-NIR, IR AND RAMAN SPECTROSCOPIES AND QUANTUM CHEMISTRY.
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. B.* **109**, pág. 10115-10125. (2005). CLAVE A

150

AUTORES: J. Casado, M.Z. Zgierski, R.G. Hicks, D.J.T. Myles, P.M. Viruela, E. Ortí, M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J. T. López Navarrete.
TÍTULO: MESITYLTHIO-OLIGOTHIOPHENES IN VARIOUS REDOX STATES. MOLECULAR AND ELECTRONIC VIEWS AS OFFERED BY SPECTROSCOPY AND THEORY.
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. A.* **109**, pág. 11275-11284. (2005). CLAVE A

151

AUTORES: R. Ponce Ortiz, J. Casado, V. Hernandez, J. T. Lopez Navarrete, E. Orti, P. M. Viruela, B. Milian, S. Hotta, G. Zotti, S. Zecchin, B. Vercelli.
TÍTULO: MAGNETIC PROPERTIES OF QUINOIDAL OLIGOTHIOPHENES. MORE THAN GOOD CANDIDATES FOR AMBIPOLAR ORGANIC SEMICONDUCTORS?
REF. REVISTA: *Adv. Func. Mater.* **16**, pág. 531-536. (2006). CLAVE A

152

AUTORES: J. Casado, V. Hernandez, M. C. Ruiz Delgado, J. T. Lopez Navarrete, T. M. Pappenfus, N. Williams, W. J. Stegner, J. C. Johnson, B. A. Edlund, D. E. Janzen, K. R. Mann, J. Orduna, B. Villacampa.
TÍTULO: OPTICAL, REDOX AND NLO PROPERTIES OF TRICYANOVINYL OLIGOTHIOPHENES. COMPARISONS BETWEEN SYMMETRIC AND ASYMMETRIC SUBSTITUTION PATTERNS.
REF. REVISTA: *Chem. Eur. J.* **12**, pág. 5458-5470. (2006). CLAVE A

153

AUTORES: J. Casado, R. Réau, J. T. López Navarrete.
TÍTULO: TUNING OF ELECTRONIC PROPERTIES IN THIENYL-PHOSPHOLE P-CONJUGATED SYSTEMS THROUGH P-FUNCTIONALIZATION FOLLOWED BY RAMAN SPECTROSCOPY
REF. REVISTA: *Chem. Eur. J.* **12**, pág. 3759-3767. (2006). CLAVE A

154

AUTORES: D. Collado, E. Pérez-Inestrosa, R. Suau, J. T. López Navarrete,
TÍTULO: REGIOSELECTIVE HYDROXYLATION OF PHENOLS BY SIMULTANEOUS PHOTOCHEMICAL GENERATION OF PHENOL CATION-RADICAL AND HYDROXYL RADICAL
REF. REVISTA: *Tetrahedrom* **32**, pág. 2927-2935-3767. (2006). CLAVE A

155

AUTORES: J. Casado, M.Z. Zgierski, E. Mena-Osteritz, G. Fuhrmann, P. Bauerle, J. T. López Navarrete,
TÍTULO: STRUCTURAL IMPLICATIONS OF RING SHAPE, DIMENSION AND METAL ATOM INSERTION IN NANO-SIZED CYCLIC OLIGOTHIOPHENES. JOINT RAMAN AND DFT STUDY.
REF. REVISTA: *J. Chem. Phys.* **125**, pág.045118-1 – 045118-9 (2006). CLAVE A

156

AUTORES: G. Zotti, S. Zecchin, B. Vercelli, A. Berlin, J. Casado, V. Hernandez, R. Ponce Ortiz, J. T. Lopez Navarrete, E. Orti, P. M. Viruela, B. Milian.
TÍTULO: MAGNETIC AND CONDUCTIVE PROPERTIES OF QUINOIDAL OLIGOTHIOPHENES.
REF. REVISTA: *Chem. Mat.* **18**, pág. 1539-1545. (2006). CLAVE A

157

AUTORES: J. Casado, M. Moreno Oliva, M.C. Ruiz Delgado, R. Ponce Ortiz, J.J. Quirante, J. T. Lopez Navarrete, K. Takimiya, T. Otsubo.

TÍTULO: HYBRID ORGANIC SEMICONDUCTORS INCLUDING CHALCOGEN ATOMS IN π -CONJUGATED SKELETONS. TUNING OF OPTICAL, REDOX AND VIBRATIONAL PROPERTIES BY HEAVY ATOM CONJUGATION.

REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.A.* **110**, pág. 7422-7430. (2006). CLAVE A

158

AUTORES: J. Casado, M. Z. Zgierski, P.C. Ewbank, M.W. Burand, D.E. Janzen, K.R. Mann, T. M. Pappenfus, A. Berlin, E.I Pérez-Inestrosa, R. Ponce Ortiz, J.T. López Navarrete.

TÍTULO: EXPLORATION OF GROUND AND EXCITED ELECTRONIC STATES OF AROMATIC AND QUINOID S,S'-DIOXIDE TERTHIOPHENES. COMPLEMENTARY SYSTEMS FOR ENHANCED ELECTRONIC ORGANIC MATERIALS.

REF. REVISTA: *J.Am.Chem.Soc.* **128**, pág. 10134-10144. (2006). CLAVE A

159

AUTORES: M. Moreno Oliva, J. Casado, G. Hennrich, J.T. López Navarrete.

TÍTULO: OCTOPOLAR CHROMOPHORES BASED ON DONOR – AND ACCEPTOR-SUBSTITUTED 1,3,5-TRIS(PHENYLETHYNYL)BENZENES: IMPACT OF *META*-CONJUGATION ON THE MOLECULAR AND ELECTRONIC STRUCTURE BY MEANS OF SPECTROSCOPY AND THEORY.

REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.B.* **110**, pág. 19198-19206. (2006). CLAVE A

160

AUTORES: M. Moreno Oliva, J. Casado, M.M. Raposo, A.M. Fonseca, H. Hartmann, V. Hernández, J.T. López Navarrete.

TÍTULO: STRUCTURE-PROPERTY RELATIONSHIPS IN PUSH-PULL AMINO/CYANOVINYL END-CAPPED OLIGOTHIOPHENES: QUANTUM CHEMICAL AND EXPERIMENTAL STUDIES.

REF. REVISTA: *J.Org.Chem.* **71**, pág. 7509-7520. (2006). CLAVE A

161

AUTORES: J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete.

TÍTULO: OLIGOTIOPHENOS EN ELECTRÓNICA Y FOTÓNICA ORGÁNICA. TÉCNICAS QUÍMICO-FÍSICAS Y ESTABLECIMIENTO DE RELACIONES ESTRUCTURA-PROPIEDAD.

REF. REVISTA: *An.Quím.* **102**, pág. 53-59. (2006). CLAVE R

 162

AUTORES: R. Ponce Ortiz, R. Malavé Osuna, M. C. Ruiz Delgado, J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, Y. Sakamoto, T. Suzuki

CAPITULO: PERFLUORINATION OF TETRACENE: EFFECTS ON THE OPTICAL GAP AND ELECTRON-ACCEPTOR PROPERTIES. AN ELECTROCHEMICAL, THEORETICAL DFT, AND RAMAN SPECTROSCOPIC STUDY.

LIBRO: *XXIX Organic Optoelectronics and Photonics II*

EDITORES: P.L. Heremans, M. Muccini, E.A. Meulenkamp.

EDITORIAL: Proc. of SPIE Vol. 6192, 61922V-1 a V-11 (2006)

ISBN: 0277-786X CLAVE CL

163

AUTORES: R. Malavé Osuna, R. Ponce Ortiz, M. C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, X. Zhang, A.J. Matzger

CAPITULO: DFT AND RAMAN/UV-VIS-NIR SPECTROSCOPIC STUDY OF FUSED α -OLIGOTHIOPHENES WITH FIVE AND SEVEN RINGS IN NEUTRAL AND DOPED STATES.

LIBRO: *XXIX Organic Optoelectronics and Photonics II*

EDITORIAL: Proc. of SPIE Vol. 6192, 61922S-1 a S-9 (2006)

EDITORES: P.L. Heremans, M. Muccini, E.A. Meulenkamp.

ISBN: 0277-786X CLAVE CL

164

AUTORES: M. C. Ruiz Delgado, R. Malavé Osuna, J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, Y. Sakamoto, T. Suzuki, M. Kobayashi, Y. Gao, Y. Fukai, D. Da Silva Filho, J.L. Brédas.

CAPITULO: PERFLUORINATION OF TETRACENE: RAMAN STUDY AND CHARGE TRANSPORT PROPERTIES AIDED BY QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS.

LIBRO: *Lecture Series on Computer and Computational Sciences*

EDITORIAL: Brill Academic Pub. Vol. 7, p. 1408-1411. (2006)

ISSN: 1573-4196 CLAVE CL

165

AUTORES: R. Malavé, X. Zhang, A.J. Matzger, V. Hernández, J. T. López Navarrete.

TÍTULO: COMBINED QUANTUM CHEMICAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY AND SPECTROSCOPIC RAMAN AND UV-VIS-NIR STUDY OF OLIGOTHIENOACENES WITH FIVE AND SEVEN RINGS.

REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.A.* **110**, pág. 5058-5065. (2006). CLAVE A

166

AUTORES: R. Ponce Ortiz, R. Malavé Osuna, V. Hernández, J. T. López Navarrete, B. Vercelli, G. Zotti, V.V. Sumerin, E.S. Balenkova, V. Nenajdenko.

TÍTULO: PUSH-PULL BITHIENYL CHROMOPHORE WITH UNUSUAL TRANSVERSE PATH OF CONJUGATION.

REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.A.* **111**, pág. 841-851. (2007). CLAVE A

167

AUTORES: J. Andrés, M. Feliz, J. Fraxedas, V. Hernández, J. T. López Navarrete, R. Llusar, G. Sauthier, F.R. Sensato, B. Silvi, C. Bo, J.M. Campanera.
TÍTULO: COMBINED THEORETICAL AND EXPERIMENTAL ANALYSIS OF THE BONDING IN THE HETEROBIMETALLIC CUBANE-TYPE Mo_3NiS_4 AND Mo_3CuS_4 CORE CLUSTERS.
REF. REVISTA: *Inorg. Chem.* **46**, pág. 2159-2166. (2007). CLAVE A

168

AUTORES: R. Malavé Osuna, R. Ponce Ortiz, V. Hernández, J. T. López Navarrete, M. Miyasaka, S. Rajca, A. Rajca, R. Glaser.
TÍTULO: HELICALLY ANNELATED AND CROSS-CONJUGATED β -OLIGOTHIOPHENES: A FOURIER TRANSFORM RAMAN SPECTROSCOPIC AND QUANTUM CHEMICAL DENSITY FUNCTIONAL THEORY STUDY.
REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.C.* **111**, pág. 4854-4860. (2007). CLAVE A

169

AUTORES: R. Malavé Osuna, R. Ponce Ortiz, M.C. Ruiz Delgado, V. Nenajdenko, V.V. Sumerin, E.S. Balenkova, V. Hernández, J. T. López Navarrete.
TÍTULO: FOURIER TRANSFORM RAMAN AND DFT STUDY OF THREE ANNULATED OLIGOTHIOPHENES WITH DIFFERENT MOLECULAR SHAPES.
REF. REVISTA: *Chem. Phys.Chem.* **8**, pág. 745-750. (2007). CLAVE A

170

AUTORES: M. Moreno Oliva, M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, M.M. Raposo, A.M. Fonseca, H. Hartmann, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: QUANTUM CHEMICAL DFT AND SPECTROSCOPIC UV-VIS-NIR ANALYSIS OF A SERIES OF PUSH-PULL OLIGOTHIOPHENES END-CAPPED BY AMINO/CYANOVINYL GROUPS.
REF. REVISTA: *Computing Letters*, **3**, pág. 1-12 (2007). CLAVE A

171

AUTORES: J. Casado, M. Moreno Oliva, M.C. Ruiz Delgado, J. T. López Navarrete, L. Sánchez, N. Martín, R. Andreu, L. Carrasquer, J. Garín, J. Orduna.
TÍTULO: VIBRATIONAL FINGERPRINT OF THE STRUCTURAL TUNING IN PUSH-PULL PROAROMATIC SPACERS.
REF. REVISTA: *J. Chem. Phys.* **126**, pág.074701-1-074701-8. (2007). CLAVE A

172

AUTORES: M. Moreno Oliva, G. Hennrich, J. Casado, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: VIBRATIONAL SPECTRA OF NONLINEAR OPTICAL CHROMOPHORES BASED ON OCTOPOLAR C_3 -SYMMETRIC 1,3,5-TRISALKYNYLBENZENES.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.* **834-836**, pág. 369-373. (2007). CLAVE A

173
AUTORES: M. Moreno Oliva, M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, J.T. López Navarrete, V. Troaini, P. de la Cruz, F. Langa.
TÍTULO: VIBRATIONAL SPECTRA OF OLIGOTHIENYL-VINYLENES WITH DONOR-PI-DONOR AND DONOR-PI-ACCEPTOR SUBSTITUTION PATTERNS.
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.* **834-836**, pág. 374-379. (2007). CLAVE A

174
AUTORES: J.T. López Navarrete, J. Casado, F.J. Ramírez
TÍTULO: ELECTRONIC SPECTROSCOPY STUDY AND MOLECULAR DOCKING SIMULATION OF THE INTERACTION OF TERTHIOPHENE WITH DNA
REF. REVISTA: *J. Mol. Struct.* **834-836**, pág. 176-181. (2007). CLAVE A

175
AUTORES: G. Zotti, B. Vercelli, M. Battagliarin, A. Berlin, V. Hernández, J. T. López Navarrete.
TÍTULO: OLIGOTHIOPHENE- AND OLIGOPYRROLE-MEDIATED AGGREGATION OF GOLD NANOPARTICLES.
REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.C.* **111**, pág. 5886-5892. (2007). CLAVE A

176
AUTORES: M. Moreno Oliva, J. Casado, J.T. López Navarrete, R. Berridge, P.J. Skabara, A.L. Kanibolotsky, I.F. Perepichka.
TÍTULO: ELECTRONIC AND MOLECULAR STRUCTURES OF TRIGONAL TRUXENE-CORE SYSTEMS CONJUGATED TO PERIPHERAL FLUORENE BRANCHES. SPECTROSCOPIC AND THEORETICAL STUDY.
REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.B.* **111**, pág. 4026-4035. (2007). CLAVE A

177
AUTORES: Y. Vida, R. Suau, J. Casado, A. Berlin, J. T. López Navarrete, E. Pérez-Inestrosa.
TÍTULO: ELECTROPOLYMERIZABLE TERTHIOPHENE S,S- DIOXIDE-FULLERENE DIELS-ALDER ADDUCT FOR DONOR/ACCEPTOR DOUBLE-CABLE POLYMERS.
REF. REVISTA: *Macromol. Rapid Commun.* **28**, pág. 1345-1349. (2007). CLAVE A

178
AUTORES: R. Malavé Osuna, R. Ponce Ortiz, T. Okamoto, Y. Suzuki, S. Yamaguchi, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: THIOPHENE- AND SELENOPHENE-BASES HETEROACENES: COMBINED QUANTUM CHEMICAL DFT AND SPECTROSCOPIC RAMAN UV-VIS-NIR STUDY.
REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.B.* **111**, pág. 7488-7496. (2007). CLAVE A

179

AUTORES: J. Casado, M.Z. Zgierski, M.C. Ruiz Delgado, J.T. López Navarrete, M. Mas-Torrent, C. Rovira.
TÍTULO: TETRATHIAFULVALENE-BASED MATERIALS FOR ORGANIC FIELD EFFECT TRANSISTORS. INSPECTION OF THEIR SEMICONDUCTOR PROPERTIES BY MEANS OF MOLECULAR SPECTROSCOPY AND QUANTUM CHEMISTRY.
REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.C.* **111**, pág. 10110-10118. (2007). CLAVE A

180

AUTORES: J.L. Delgado, P. de la Cruz, A. Urbina, J.T. López Navarrete, J. Casado, F. Langa.
TÍTULO: THE FIRST SYNTHESIS OF A CONJUGATED HYBRID OF C60-FURELLENE AND SINGLE-WALL CARBON NANOTUBE.
REF. REVISTA: *Carbon* **45**, pág. 250-252. (2007) CLAVE A

181

AUTORES: E. Gomar-Nadal, L. Múgica, J. Vidal-Gancedo, J. Casado, J.T. López Navarrete, J. Veciana, C. Rovira, D. Amabilino.
TÍTULO: SYNTHESIS AND DOPING OF A MULTIFUNCTIONAL TETRATHIAFULVALENE-SUBSTITUTED POLY(ISOCYANIDE).
REF. REVISTA: *Macromolecules* **40**, pág. 7521-7531. (2007). CLAVE A

182

AUTORES: R. Ponce Ortiz, J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, P.M. Viruela, E. Ortí, K. Takimiya, T. Otsubo.
TÍTULO: ON THE BIRADICALOID NATURE OF LONG QUINOIDAL OLIGOTHIOPHENES: NEW EXPERIMENTAL EVIDENCES GUIDED BY THEORETICAL STUDIES.
REF. REVISTA: *Angew.Chem.Int.Ed.* **46**, p. 9057-9061 (2007). CLAVE A

183

AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, J. Orduna, M. Moreno Oliva, J. Casado, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: THEORETICAL UNDERSTANDING OF INCREMENT OF β UPON PROTONATION OF PYRIDINE PERIPHERAL OCTUPOLAR MOLECULES: TOWARD NON LINEAR OPTICAL SENSORS.
REF. REVISTA: *J.Chem.Phys.* **127**, pág. 164704(1-6) (2007). CLAVE A

184

AUTORES: M. Moreno Oliva, J. Casado, J.T. López Navarrete, G. Hennrich, M.C. Ruiz Delgado, J. Orduna.
TÍTULO: LINEAR AND NON-LINEAR OPTICAL PROPERTIES OF PYRIDINE BASED OCTUPOLAR CHROMOPHORES DESIGNED FOR CHEMICAL SENSING. JOINT SPECTROSCOPIC AND THEORETICAL STUDY.
REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.C* **111**, pág. 18778-18784. (2007). CLAVE A

185

AUTORES: M. C. Ruiz Delgado, J. Casado, R. Ponce Ortiz, V. Hernández, J.T. López Navarrete, O.-K. Kim, H.Y. Woo, B. Villacampa, R. Alicante, J. Orduna, J. Garín
CAPITULO: NLO PROPERTIES OF DITHIENOTHIOPHENE-BASED CHROMOPHORES: A COMPARISON STUDY BETWEEN THE DONOR/DONOR AND DONOR/ACCEPTOR SUBSTITUTION PATTERNS.
LIBRO: *Linear and Nonlinear Optics of Organic Materials VII*
EDITORES: Jean-Michel Nunzi.
EDITORIAL: Proc. of SPIE Vol. 6653, 66530X-1 a X-9 (2007)
ISBN: 9780819468017 CLAVE CL

186

AUTORES: J. Casado, S. Patchkovskii, M.Z. Zgierski, L. Hermosilla, C. Sieiro, M. Moreno Oliva, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: RAMAN DETECTION OF "AMBIGUOUS" CONJUGATED BIRADICALS: RAPID THERMAL SINGLET-TO-TRIPLET INTERSYSTEM CROSSING IN NA EXTENDED VIologen.
REF. REVISTA: *Angew.Chem.Int.Ed.* **47**, pág. 1443-1446. (2008). CLAVE A

187

AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, J. Orduna, B. Villacampa, R. Alicante, J.M. Raimundo, P. Blanchard, J. Roncali.
TÍTULO: ELECTRONIC, OPTICAL, AND VIBRATIONAL PROPERTIES OF BRIDGED DITHIENYLETHYLENE-BASED NLO CHROMOPHORES.
REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.C* **112**, pág. 3109-3120. (2008). CLAVE A

188

AUTORES: S.R. González, J. Casado, J.T. López Navarrete, R. Blanco, J.L. Segura.
TÍTULO: A β -NAPHTHALENEIMIDE-MODIFIED TERTHIOPHENE EXHIBITING CHARGE TRANSFER AND POLARIZATION THROUGH THE SORT MOLECULAR AXIS. JOINT SPECTROSCOPIC AND THEORETICAL STUDY.
REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.A* **112**, pág. 6732-6740. (2008). CLAVE A

189

AUTORES: J. Casado, K. Takimiya, T. Otsubo, F.J. Ramírez, J.J. Quirante, R. Ponce Ortiz, S.R. González, M. Moreno Oliva, J.T. López Navarrete.

TÍTULO: RAMAN SPECTROSCOPY SHOWS INTERCHAIN THROUGH SPACE CHARGE DELOCALIZATION IN A MIXED VALENCE OLIGOTHIOPHENE CATION AND ITS Π -DIMERIC DICATION.

REF. REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.* **130**, pág. 14028-14029. (2008). CLAVE A

190

AUTORES: G. Zotti, B. Vercelli, A. Berlin, S. Destri, M. Pasini, V. Hernández, J.T. López Navarrete.

TÍTULO: ELECTROCHEMICAL, MAGNETIC AND ELECTRICAL PROPERTIES OF α,ω -CAPPED SEXITHIOPHENE FILMS. PART 3. CONDUCTION IN POLY(BIS-TERTHYENYL-B)_s (B = ETHANE, DISULFIDE, DIACETYLENE, ACETYLENE, ETHYLENE).

REF. REVISTA: *Chem. Mat.* **20**, pág. 6847-6856. (2008). CLAVE A

191

AUTORES: R. Ponce Ortiz, M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete.

TÍTULO: VIII ESCUELA NACIONAL DE MATERIALES MOLECULARES. UN COMPLEMENTO DOCENTE ADECUADO EM LA FORMACIÓN ACADÉMICA DE ESTUDIANTES DE DOCTORADO Y MASTERS.

REF. REVISTA: *Bol. Soc. Quím. Méx.* **2**, pág. 75-79. (2008). CLAVE A

192

AUTORES: R. Ponce Ortiz, A. Facchetti, T.J. Marks, J. Casado, M. Zgierski, M. Kozaki, V. Hernández, J. T. López Navarrete

TÍTULO: AMBIPOLAR ORGANIC FIELD-EFFECT TRANSISTORS FROM CROSS-CONJUGATED AROMATIC QUATERTHIOPHENES. COMPARISON WITH QUINOIDAL PARENT MATERIALS.

REF. REVISTA: *Adv. Funct. Mat.* **19**, pág. 386-394. (2009). CLAVE A

193

AUTORES: J. Casado, S.R. González, M. Moreno Oliva, J. T. López Navarrete, R. Caballero, P. de la Cruz, F. Langa

TÍTULO: FERROCENE THIENO-VINYLENE OLIGOMER: DONOR-ACCEPTOR POLARIZATION AND MIXED VALENCE PROPERTIES IN THE RAMAN MAPPING OF LOCALIZED-TO-DELOCALIZED TRANSITIONS.

REF. REVISTA: *Chem. Eur. J.* **15**, pág. 2548-2559. (2009). CLAVE A

194

AUTORES: A. Schmidt, B. Snovydovych, J. Casado, J.J. Quirante, J.T. López Navarrete, F.J. Ramírez
TÍTULO: QUANTUM MECHANICAL STUDY AND VIBRATIONAL SPECTRA OF INDAZOLIUM-3-CARBOXYLATE AND ITS DECARBOXYLATION PRODUCT, THE N-HETEROCYCLIC CARBENE INDAZOL-3-YLIDENE
REF. REVISTA: *Phys.Chem.Chem.Phys.* **11**, pág. 341-348. (2009). CLAVE A

195

AUTORES: C. Capel, J. Casado, J.T. López Navarrete, A. Schmidt, A. Dreger, F.J. Ramírez
TÍTULO: A RAMAN APPROACH TO PSEUDO-CROSS-CONJUGATION IN MESOMERIC BETAINES
REF. REVISTA: *J.Raman Spectrosc.* **40**, pág. 238-239. (2009). CLAVE A

196

AUTORES: M. C. Ruiz Delgado, K. R. Pigg, D. A. da Silva Filho, N. E. Gruhn, Y. Sakamoto, T. Suzuki, R. Malave Osuna, J. Casado, V. Hernandez, J. T. Lopez Navarrete, N. G. Martinelli, J. Cornil, R. S. Sanchez-Carrera, V. Coropceanu, J. L. Bredas.
TÍTULO: IMPACT OF PERFLUORINATION ON THE CHARGE-TRANSPORT PARAMETERS OF OLIGOACENE CRYSTALS
REF. REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.*, **131**, pág. 1502-1512. (2009). CLAVE A

197

AUTORES: R. Ponce Ortiz, J. Casado, V. Hernandez, J. T. Lopez Navarrete, J. A. Letizia, A. Facchetti, M. A. Ratner, T. J. Marks.
TÍTULO: THIOPHENE-DIAZINE MOLECULAR SEMICONDUCTORS. SYNTHESIS, STRUCTURAL, ELECTROCHEMICAL, OPTICAL AND ELECTRONIC STRUCTURAL PROPERTIES; IMPLEMENTATION IN ORGANIC FIELD-EFFECT TRANSISTORS.
REF. REVISTA: *Chem. Eur. J.*, **15**, pág. 5023-5039. (2009). CLAVE A

198

AUTORES: R. Ponce Ortiz, J. Casado, V. Hernandez, J. T. Lopez Navarrete, J. A. Letizia, A. Facchetti, M. A. Ratner, T. J. Marks.
TÍTULO: COVER: THIOPHENE-DIAZINE MOLECULAR SEMICONDUCTORS. SYNTHESIS, STRUCTURAL, ELECTROCHEMICAL, OPTICAL AND ELECTRONIC STRUCTURAL PROPERTIES; IMPLEMENTATION IN ORGANIC FIELD-EFFECT TRANSISTORS (CEJ 20/2009).
REF. REVISTA: *Chem. Eur. J.*, **15**, pág. 4959. (2009). CLAVE A

199

AUTORES: R. Ponce Ortiz, S.R. González, J. Casado, J. T. López Navarrete, D.L. Officer, P. Wagner, J.C. Earles, K.C. Gordon.
TÍTULO: ELECTRONIC STUDIES ON OLIGOTHIENYLENEVINYLENES: UNDERSTANDING THE NATURE OF THEIR GROUND AND EXCITED ELECTRONIC STATES.
REF. REVISTA: *Chem.Phys.Chem.* **10**, pág. 1901-1910. (2009). CLAVE A

200

AUTORES: M. Moreno Oliva, J. Casado, J. T. López Navarrete, G. Hennrich, S. van Cleuvenbergen, I. Asselberghs, K. Clays, M.C. Ruiz Delgado, J.L. Bredas, J.S. Seixas de Melo, L. De Cola.

TÍTULO: SYNTHESIS, SPECTROSCOPY, NONLINEAR OPTICS, AND THEORETICAL INVESTIGATIONS OF THYENYLETHYNYL OCTOPOLES WITH A TUNABLE CORE.

REF. REVISTA: *Chem.Eur.J.* **15**, pág. 8223-8234. (2009). CLAVE A

201

AUTORES: V. Navarro-Fuster, E.M. Calzado, M.G. Ramírez, P.J. Boj, J.T. Henssler, A.J. Matzger, V. Hernández, J. T. López Navarrete, M.A. Diaz-García.

TÍTULO: EFFECT OF RING FUSION ON THE AMPLIFIED SPONTANEOUS EMISSION PROPERTIES OF OLIGOTHIOPHENES.

REF. REVISTA: *J.Mat.Chem.* **19**, pág. 6556-6567. (2009). CLAVE A

202

AUTORES: M.L. Rodríguez-Méndez, C. Apetrei, M. Nieto, V. Hernández, J.T. López Navarrete, F. Effenberger, J.A. de Saja.

TÍTULO: SENSING PROPERTIES OF ORGANISED FILMS BASED ON A BITHIOPHENE DERIVATIVE.

REF. REVISTA: *Sensors and Actuators B-Chem..* **141**, pág. 625-633. (2009). CLAVE A

203

AUTORES: R. Malavé Osuna, M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J. T. López Navarrete, B. Vercelli, G. Zotti, J. J. Novoa, Y. Suzuki, S. Yamaguchi, J. T. Henssler, A. J. Matzger.

TÍTULO: OXIDATION OF END-CAPPED PENTATHIENOACENES AND CHARACTERIZATION OF THEIR RADICAL CATIONS.

REF. REVISTA: *Chem.Eur.J.* **15**, pág. 12346-12361. (2009). CLAVE A

204

AUTORES: R. Malavé Osuna, V. Hernández, J. T. López Navarrete, J. Aragón, P. M. Viruela, E. Ortí, Y. Suzuki, S. Yamaguchi, J.T. Henssler, A. J. Matzger

TÍTULO: FT RAMAN AND DFT STUDY ON A SERIES OF ALL-ANTI OLIGOTHIENOACENES END-CAPPED WITH TRIISOPROPYLSILYL GROUPS

REF. REVISTA: *Chem.Phys.Chem.* **10**, pág. 3069-3076 (2009). CLAVE A

205

AUTORES: M. Moreno Oliva, S. Rodríguez González, J. Casado, J.T. López Navarrete, J.S. Seixas de Melo, S. Rozen.

TÍTULO: OPTICAL PROPERTIES OF [ALL]-S,S-DIOXIDE OLIGOTHIOPHENES.

REF. REVISTA: *Portugaliae Electrochimica* . **27**, pág. 533-537. (2009). CLAVE A

206

AUTORES: R. Ponce Ortiz, J. Casado, S. Rodríguez González, V. Hernández, J.T. López Navarrete, P.M. Viruela, E. Ortí, K. Takimiya, T. Otsubo.
TÍTULO: QUINOIDAL OLIGOTHIOPHENES: TOWARD BIRADICAL GROUND-STATE SPECIES
REF. REVISTA: *Chem.Eur.J.* **16**, pág. 470-484 (2010) CLAVE A

207

AUTORES: J. Aragón, P. M. Viruela, E. Ortí, R. Malavé Osuna, B. Vercelli, G. Zotti, V. Hernández, J. T. López Navarrete, J.T. Henssler, A. J. Matzger, Y. Suzuki, S. Yamaguchi
TÍTULO: NEUTRAL AND OXIDIZED TRIISOPROPYLSILYL END-CAPPED OLIGOTHIENOACENES: A COMBINED ELECTROCHEMICAL, SPECTROSCOPIC, AND THEORETICAL STUDY
REF. REVISTA: *Chem.Eur.J.* **16**, pág. 5481-5491 (2010) CLAVE A

208

AUTORES: A. Schmidt, A.S. Lindner, J. Casado, J.T. López Navarrete, F.J. Ramírez
TÍTULO: MESOMERIC BETAINE CHEMISTRY IN SOLUTION: SOLVENT EFFECT ON THE STRUCTURE AND SPECTRA OF URACILYL-PYRIDINIUM BETAINE
REF. REVISTA: *Chem.Phys.* **371**, pág. 1-9 (2010). CLAVE A

209

AUTORES: R. Malavé Osuna, V. Hernández, J. T. López Navarrete, E.I. Kauppinen, V. Ruiz
TÍTULO: ULTRAFAST AND HIGH-CONTRAST ELECTROCHROMISM ON BENDABLE TRANSPARENT CARBON NANOTUBE ELECTRODES
REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.Lett.* **1**, pág. 1367-1371 (2010). CLAVE A

210

AUTORES: M. Moreno Oliva, J. Casado, J. T. López Navarrete, S. Patchkovskii, T. Goodson III, M.R. Harpham, J.S. Seixas de Melo, E. Amir, S. Rozen
TÍTULO: DO [ALL]-S,S'-DIOXIDE OLIGOTHIOPHENES SHOW ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES OF OLIGOENES AND/OR OF OLIGOTHIOPHENES?
REF. REVISTA: *J.Am.Chem.Soc.* **132**, pág. 6231-6242. (2010). CLAVE A

211

AUTORES: B. Nieto-Ortega, F.J. Ramírez, G. Hennrich, B. Gómez-Lor, J. Casado, J. T. López Navarrete
TÍTULO: AGGREGATION BEHAVIOR OF A CONJUGATED C-3-SYMMETRIC MOLECULE: A DESCRIPTION BASED ON CHIRO-OPTICAL EXPERIMENTAL AND THEORETICAL SPECTROSCOPIES
REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.B* **114**, pág. 5710-5717 (2010). CLAVE A

212

AUTORES: M. Moreno Oliva, T.M. Pappenfus, J.H. Melby, K.M. Schwaderer, J.C. Johnson, K.A. McGee, D.A. da Silva, J.L. Bredas, J. Casado, J. T. López Navarrete

TÍTULO: COMPARISON OF THIOPHENE-PYRROLE OLIGOMERS WITH OLIGOTHIOPHENES: A JOINT EXPERIMENTAL AND THEORETICAL INVESTIGATION OF THEIR STRUCTURAL AND SPECTROSCOPIC PROPERTIES

REF. REVISTA: *Chem.Eur.J.* **16**, pág. 6866-6876 (2010). CLAVE A

213

AUTORES: P. Iavicoli, H. Xu, L.N. Feldborg, M. Linares, M. Paradinas, S. Stafström, C. Ocal, B. Nieto-Ortega, J. Casado, J. T. López Navarrete, R. Lazzaroni, S. de Feyter, D.B. Amabilino

TÍTULO: TUNING THE SUPRAMOLECULAR CHIRALITY OF ONE- AND TWO-DIMENSIONAL AGGREGATES WITH THE NUMBER OF STEREOGENIC CENTERS IN THE COMPONENT PORPHYRINS

REF. REVISTA: *J.Am.Chem.Soc.* **132**, pág. 9350-9362 (2010). CLAVE A

214

AUTORES: B. Vercelli, G. Zotti, A. Berlin, C. Capel Ferrón, V. Hernández, J. T. López Navarrete

TÍTULO: SEIRA AND SERS EFFECTS IN CYCLOPENTABITHIOPHENETHIOL-CAPPED GOLD NANOPARTICLES

REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.C* **114**, pág. 12900-12904 (2010). CLAVE A

215

AUTORES: J.L. Zafra, I.I. Pepepichka, I.F. Perepichka, M.R. Bryce, F.J. Ramírez, J. Casado, J.T. López Navarrete

CAPITULO: RAMAN SPECTRA AND QUANTUM CHEMISTRY CALCULATIONS OF FLUORENE-DIBENZOTHIOPHENE-S,S-DIOXIDE OLIGOMERS

LIBRO: *AIP CONFERENCE PROCEEDINGS: XXII INTERNATIONAL CONFERENCE ON RAMAN SPECTROSCOPY*

EDITORES: P.M. Champion, L.D. Ziegler

EDITORIAL: AIP Conference Proceedings, 1267: 683-684 (2010)

ISBN: 978-0-7354-0818-0 CLAVE CL

216

AUTORES: R.S. Sánchez-Carrera, M.C. Ruiz Delgado, C. Capel Ferrón, R. Malavé Osuna, V. Hernández, J. T. López Navarrete, A. Aspuru-Guzik

TÍTULO: OPTICAL ABSORPTION AND EMISSION PROPERTIES OF END-CAPPED OLIGOTHIENOACENES: A JOINT THEORETICAL AND EXPERIMENTAL STUDY

REF. REVISTA: *Organic Electronics* **11**, pág. 1701-1712 (2010). CLAVE A

217
AUTORES: D. Collado, J. Casado, S. Rodríguez González, J.T. López Navarrete, R. Suau, E. Pérez-Inestrosa, T.M. Pappenfus, M.M. Raposo
TÍTULO: ENHANCED FUNCTIONALITY FOR DONOR-ACCEPTOR OLIGOTHIOPHENES BY MEANS OF INCLUSION OF BODIPY: SYNTHESIS, ELECTROCHEMISTRY, PHOTOPHYSICS, AND MODEL CHEMISTRY
REF. REVISTA: *Chem.Eur.J.* **17**, pág. 498-507 (2011) CLAVE A

218
AUTORES: R. Andreu, E. Galán, J. Orduna, B. Villacampa, R. Alicante, J.T. López Navarrete, J. Casado, J. Garín
TÍTULO: AROMATIC/PROAROMATIC DONORS IN 2-DICYANOMETHYLENETHIAZOLE MERCYANINES: FROM NEUTRAL TO STRONGLY ZWITTERIONIC NONLINEAR OPTICAL CHROMOPHORES
REF. REVISTA: *Chem.Eur.J.* **17**, pág. 826-838 (2011) CLAVE A

219
AUTORES: J. Casado, J.T. López Navarrete
TÍTULO: THE LONGEST QUINOIDAL OLIGOTHIOPHENE: A RAMAN STORY
REF. REVISTA: *The Chemical Record.* **11**, pág. 45-53 (2011) CLAVE R

220
AUTORES: J.L. Zafra, J. Casado, I.I. Pepepichka, I.F. Perepichka, M.R. Bryce, F.J. Ramírez, J.T. López Navarrete
TÍTULO: π -CONJUGATION AND CHARGE POLARIZATION IN FLUORENE-DIBENZOTHIOPHENE-S,S-DIOXIDE CO-OLIGOMERS BY RAMAN SPECTROSCOPY AND QUANTUM CHEMISTRY
REF. REVISTA: *J.Chem.Phys.* **134**, pág. 044520-1-11 (2011) CLAVE A

221
AUTORES: J. Aragón, P. M. Viruela, E. Ortí, R. Malavé Osuna, V. Hernández, J. T. López Navarrete, C.R. Swartz, J.E. Anthony
TÍTULO: FUNCTIONALIZED PENTACENES: A COMBINED THEORETICAL, RAMAN AND UV-VIS SPECTROSCOPIC STUDY
REF. REVISTA: *Theor.Chem.Acc.* **128**, pág. 521-530 (2011) CLAVE A

222
AUTORES: R. Malavé Osuna, V. Hernández, J. T. López Navarrete, E. D'Oria, J.J. Novoa
TÍTULO: THEORETICAL EVALUATION OF THE NATURE AND STRENGTH OF THE F...F INTERMOLECULAR INTERACTIONS PRESENT IN FLUORINATED HYDROCARBONS
REF. REVISTA: *Theor.Chem.Acc.* **128**, pág. 541-553 (2011) CLAVE A

223

AUTORES: T.M. Pappenfus, D.K. Schneiderman, J. Casado, J.T. López Navarrete, M.C. Ruiz Delgado, G. Zotti, B. Vercelli, M.D. Lovander, L.M. Hinkle, J.N. Bohnsack, K.R. Mann

TÍTULO: OLIGOTHIOPHENE TETRACYANO BUTADIENES: ALTERNATIVE DONOR-ACCEPTOR ARCHITECTURES FOR MOLECULAR AND POLYMERIC MATERIALS

REF. REVISTA: *Chem.Mater.* **23**, pág. 823-831 (2011) CLAVE A

224

AUTORES: B. Nieto-Ortega, J. Casado, E.W. Blanch, J. T. López Navarrete, A.R. Quesada, F.J. Ramírez

TÍTULO: RAMAN OPTICAL ACTIVITY SPECTRA AND CONFORMATIONAL ELUCIDATION OF CHIRAL DRUGS. THE CASE OF THE ANTIANGIOGENIC AEROPLYSININ-1

REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.A* **115**, pág. 2752-2755 (2011). CLAVE A

225

AUTORES: P. Rivera-Fuentes, B. Nieto-Ortega, W.B. Schweizer, J. T. López Navarrete, J. Casado, F. Diederich

TÍTULO: ENANTIOPURE, MONODISPERSE ALLENO-ACETYLENIC CYCLOOLIGOMERS: EFFECT OF SYMMETRY AND CONFORMATIONAL FLEXIBILITY ON CHIROPTICAL PROPERTIES OF CARBON-RICH COMPOUNDS

REF. REVISTA: *Chem.Eur.J.* **17**, pág. 3876-3885 (2011) CLAVE A

226

AUTORES: R. Ponce Ortiz, M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete

TÍTULO: THE VIII-SPANISH NATIONAL SCHOOL ON MOLECULAR MATERIALS (VIII-ENMM): A TOOL TO COMPLEMENT THE SCIENTIFIC TRAINING OF PhD AND MASTER STUDENTS IN MATERIALS

REF. REVISTA: *J.Mater.Ed.* **33**, pág. 13-26 (2011). CLAVE R

227

AUTORES: J.E. Raymond, J. Casado, J. T. López Navarrete, K. Takimiya, T. Goodson

TÍTULO: TWO-PHOTON MEDIATED THREE-PHOTON FLUORESCENCE: LESSONS FROM QUINOIDAL OLIGOTHIOPHENE DIMER

REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.Lett.* **2**, pág. 2179-2183 (2011). CLAVE A

228

AUTORES: R. Juárez, M. Moreno Oliva, M. Ramos, J.L. Segura, C. Alemán, F. Rodríguez-Ropero, D. Curco, F. Montilla, V. Coropceanu, J.L. Bredas, Y.B. Qui, A. Kahn, M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, J. T. López Navarrete

TÍTULO: HEXAAZATRIPHENYLENE (HAT) VERSUS TRI-HAT: THE BIGGER THE BETTER?

REF. REVISTA: *Chem.Eur.J.* **17**, pág. 10312-10322 (2011). CLAVE A

229

AUTORES: S. Rodríguez González, J. Orduna, R. Alicante, B. Villacampa, K.A. McGee, J. Pina, J. Seixas de Melo, K.M. Schwaderer, J.C. Johnson, B.A. Blackorbay, J.J. Hansmeier, V.F. Bolton, T.J. Helland, B.A. Edlund, T.M. Pappenfus, J. T. López Navarrete, J. Casado

TÍTULO: UNDERSTANDING OPTOELECTRONIC PROPERTIES OF CYANO-TERMINATED OLIGOTHIOPHENES IN THE CONTEXT OF INTRAMOLECULAR CHARGE TRANSFER

REF. REVISTA: *J.Phys.Chem.B* **115**, pág. 10573-10585 (2011) CLAVE A

230

AUTORES: B. Nieto-Ortega, J. Casado, J. T. López Navarrete, G. Hennrich, F.J. Ramírez

TÍTULO: ON THE ORIGIN OF THE CHIRAL-OPTICAL ACTIVITY IN SUPRAMOLECULAR ASSEMBLIES: A QUANTUM CHEMICAL STUDY OF C(3) OCTOPOLAR SYSTEMS

REF. REVISTA: *J.Chem.Theor.Comp.* **7**, pág. 3314-3322 (2011) CLAVE A

231

AUTORES: S. Rodríguez González, Y. Ie, Y. Aso, J. T. López Navarrete, J. Casado

TÍTULO: THE FRONTIERS OF QUINOIDAL STABILITY IN LONG OLIGOTHIOPHENES: RAMAN SPECTRA OF DICATIONIC POLARON PAIRS

REF. REVISTA: *J.Am.Chem.Soc.* **133**, pág. 16350-16353 (2011). CLAVE A

232

AUTORES: C. Capel Ferrón, M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J. T. López Navarrete, B. Vercelli, G. Zotti, M. Capdevila Cortada, J. J. Novoa, W.J. Niu, M.Q. He, F. Hartl

TÍTULO: SUBSTITUENT AND COUNTERION EFFECTS ON THE FORMATION OF Π -DIMER DICATIONS OF END-CAPPED HEPTATHIENOACENES

REF. REVISTA: *Chem.Comm.* **47**, pág. 12622-12624 (2011). CLAVE A

233

AUTORES: S. Rodríguez González, J. Aragón, P. M. Viruela, E. Ortí, J. T. López Navarrete, M.A. Sato, J. Casado

TÍTULO: DIFERROCENYL OLIGOTHIOPHENE WIRES: RAMAN AND QUANTUM CHEMICAL STUDY OF VALENCE-TRAPPED CATIONS

REF. REVISTA: *J.Chem.Phys.* **135**, pág. 234705-1-5 (2011) CLAVE A

234

AUTORES: J. Aragón, R. Ponce Ortiz, B. Nieto-Ortega, V. Hernandez, J. Casado, A. Facchetti, T. J. Marks. P. M. Viruela, E. Ortí, J. T. Lopez Navarrete

TITULO: CARBONYL-FUNCTIONALIZED QUATERTHIOPHENES: A STUDY OF THE VIBRATIONAL RAMAN AND ELECTRONIC ABSORTION/EMISSION PROPERTIES GUIDED BY THEORETICAL CALCULATIONS

REF. REVISTA: *Chem.Phys.Chem.* **13**, pág. 168-176 (2012) CLAVE A

235

AUTORES: M.F. Kuehnel, T. Schlöder, S. Riedel, B. Nieto-Ortega, F.J. Ramírez, J. T. López Navarrete, J. Casado,
TITULO: SYNTHESIS OF THE SMALLEST AXIALLY CHIRAL MOLECULE BY ASYMMETRIC CARBON-FLUORINE ACTIVATION
REF. REVISTA: *Angew.Chem.Int.Ed.* **51**, pág. 2218-2220 (2012) CLAVE A

236

AUTORES: G. Hennrich, B. Nieto-Ortega, B. Gómez-Lor, E. Gutiérrez, L. de Vega, E. Cavero, F.J. Ramírez, J. T. López Navarrete, J. Casado
TITULO: CONTROLLING THE MACROSCOPIC CHIRALITY OF ORGANIC MATERIALS BASED ON 1,3,5-TRIALKYNYL BENZENES
REF. REVISTA: *Eur.J.Org. Chem.* **8**, pág. 1577-1582 (2012) CLAVE A

237

AUTORES: J.T. López Navarrete
CAPITULO: ESPECTROSCOPIA RAMAN APLICADA A MATERIALES MOLECULARES. (pág. 293-326)
LIBRO: *XI ESCUELA NACIONAL DE MATERIALES MOLECULARES. UN CURSO DE DIAPOSITIVAS EN POWERPOINT*
EDITORES: M.L.Rodríguez Méndez, M.A. Rodríguez Pérez, J.A. de Saja
EDITORIAL: Universidad de Valladolid
ISBN: 978-84-693-2346-5 VA-94/2012 CLAVE CL

238

AUTORES: S.J. Evenson, T.M. Pappenfus, M.C. Ruiz Delgado, K.R. Radke-Wohlers, J. T. Lopez Navarrete, S.C. Rasmussen
TITULO: MOLECULAR TUNNING IN HIGHLY FLUORESCENT DITHIENO[3,2-b:2',3'-d]PYRROLE-BASED OLIGOMERS: EFFECTS ON N-FUNCTIONALIZATION AND TERMINAL ARYL UNIT
REF. REVISTA: *Phys.Chem.Chem.Phys.* **14**, pág. 6101-6111 (2012) CLAVE A

239

AUTORES: S. Rodríguez González, M.C. Ruiz Delgado, R. Caballero, P. de la Cruz, F. Langa, J. T. López Navarrete, J. Casado
TÍTULO: DELOCALIZATION-TO-LOCALIZATION CHARGE TRANSITION IN DIFERROCENYL-OLIGOTHIENYLENE-VYNILENE MOLECULAR WIRES AS A FUNCTION OF THE SIZE BY RAMAN SPECTROSCOPY
REF. REVISTA: *J.Am.Chem.Soc.* **134**, pág. 5675-5681 (2012) CLAVE A

240

AUTORES: C. Capel Ferrón, M.C. Ruiz Delgado, Ferrón, O. Gidron, S. Sharma, D. Sheberla, Y. Sheynin, M. Bendikov, J. T. López Navarrete, V. Hernández
TÍTULO: α - OLIGOFURANS SHOW A SIZEABLE EXTEND OF π -CONJUGATION AS PROBED BY RAMAN SPECTROSCOPY
REF. REVISTA: *Chem.Comm.* **48**, pág. 6732-5734 (2012) CLAVE A

241

AUTORES: J. Casado, R. Ponce Ortiz, J. T. López Navarrete
TITULO: QUINOIDAL OLIGOTHIOPHENES: NEW PROPERTIES BEHIND AN UNCONVENTIONAL ELECTRONIC STRUCTURE
REF. REVISTA: *Chem. Soc. Rev.* **41**, pág. 5672-5686 (2012) CLAVE R

242

AUTORES: B. Nieto-Ortega, F.J. Ramírez, D. Amabilino, M. Linares, D. Beljone, J. T. López Navarrete, J. Casado
TITULO: ELECTRONIC AND VIBRATIONAL CIRCULAR DICHROISM SPECTROSCOPES FOR THE UNDERSTANDING OF CHIRAL ORGANIZATION IN PORPHYRIN AGGREGATES
REF. REVISTA: *Chem. Comm.* **48**, pág. 9147-9149 (2012) CLAVE A

243

AUTORES: F. Rodríguez-Llansola, D. Hermida-Merino, B. Nieto-Ortega, F. J. Ramírez, J. T. López Navarrete, J. Casado, B. Escuder, W. Hayes, J. F. Miravet.
TITULO: SELF-ASSEMBLY STUDIES OF A CHIRAL BISUREA-BASED SUPERHYDROGELATOR
REF. REVISTA: *Chem. Eur. J.* **18**, pág. 14725-14731 (2012) CLAVE A

244

AUTORES: B. Nieto-Ortega, V.J. Nebot, J.F. Miravet, B. Escuder, J.T. López Navarrete, J. Casado, F. J. Ramírez
TITULO: VIBRATIONAL CIRCULAR DICHROISM SHOWS REVERSIBLE HELICAL HANDEDNESS SWITCHING IN PEPTIDOMIMETIC L- VALINE FIBRILS
REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. Lett.* **3**, pág. 2120-2124 (2012) CLAVE A

245

AUTORES: Z. Zeng, Y. M. Sung, N. Bao, D. Tan, R. Lee, J. L. Zafra, B. S. Lee, M. Ishida, J. Ding, J.T. López Navarrete, Y. Li, W. Zeng, D. Kim, K.-W. Huang, R. D. Webster, J. Casado, J. Wu
TÍTULO: STABLE TETRABENZO-CHICHIBABIN'S HYDROCARBONS: TUNABLE GROUND STATE AND UNUSUAL TRANSITION BETWEEN THEIR CLOSED-SHELL AND OPEN-SHELL RESONANCE FORMS
REF. REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.* **134**, pág. 14513-14525 (2012) CLAVE A

246

AUTORES: Y. Li, W.-K. Heng, B. S. Lee, N. Aratani, J. L. Zafra, N. Bao, R. Lee, Y.M. Sung, Z. Sun, K.-W. Huang, R. D. Webster, J. T. López Navarrete, D. Kim, A. Osuka, J. Casado, J. Ding, J. Wu
TÍTULO: KINETICALLY BLOCKED STABLE HEPTAZETHRENE AND OCTAZETHRENE: CLOSED-SHELL OR OPEN-SHELL IN THE GROUND STATE?
REF. REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.* **134**, pág. 14913-14922 (2012) CLAVE A

247

AUTORES: X. Guo, N. Zhou, S. J. Lou, J. W. Hennek, R. Ponce Ortiz, M. R. Butler, P.-L. T. Boudreault, J. Strzalka, P.-O. Morin, M. Leclerc, J. T. López Navarrete, M. A. Ratner, L. X. Chen, R. P. H. Chang, A. Facchetti, and T. J. Marks

TÍTULO: BITHIOPHENEIMIDE–DITHIENOSILOLE/DITHIENOGERMOL COPOLYMERS FOR EFFICIENT SOLAR CELLS: INFORMATION FROM STRUCTURE–PROPERTY–DEVICE PERFORMANCE CORRELATIONS AND COMPARISON TO THIENO[3,4-C]PYRROLE-4,6-DIONE ANALOGUES

REF. REVISTA: *J.Am.Chem.Soc.* **134**, pág. 18427-18439 (2012) CLAVE A

248

AUTORES: X. Zhu, H. Tsuji, J.T. López Navarrete, J. Casado, E. Nakamura

TÍTULO: CARBON-BRIDGED OLIGO(PHENYLENEVINYLENE)S: STABLE Π -SYSTEMS WITH HIGH RESPONSIVENESS TO DOPING AND EXCITATION

REF. REVISTA: *J.Am.Chem.Soc.* **134**, pág. 19254-19259 (2012) CLAVE A

249

AUTORES: R. González-Cano, H. Herrera, J.L. Segura, J. T. Lopez Navarrete, M.C. Ruiz Delgado, J. Casado

TÍTULO: CONFORMATIONAL CONTROL OF THE ELECTRONIC PROPERTIES OF AN ALPHA-BETA TERTHIOPHENE: LESSONS FROM A PRECURSOR TOWARDS DENDRITIC HYPERBRANCHED OLIGO- AND POLYTHIOPHENES

REF. REVISTA: *Chem.Phys.Chem.* **13**, pág. 3893-3900 (2012) CLAVE A

250

AUTORES: T. Pappenfus, k.b. Schliep, A. Dissanayake, T. Ludden, B. Nieto-Ortega, J. T. Lopez Navarrete, M.C. Ruiz Delgado, J. Casado,

TÍTULO: ORGANIC MATERIALS IN THE UNDERGRADUATE LABORATORY: MICROSCALE SYNTHESIS AND INVESTIGATION OF A DONOR-ACCEPTOR MOLECULE

REF. REVISTA: *J.Chem.Ed.* **89**, pág. 1461-1465 (2012) CLAVE A

251

AUTORES: R.D. Costa, J. Aragón, E. Ortí, T. Pappenfus, K. Mann, K. Matczyszyn, M. Samoc, J.L. Zafra, J. T. López Navarrete, J. Casado

TÍTULO: IMPACT OF THE SYNERGISTIC COLLABORATION OF OLIGOTHIOPHENE BRIDGES AND RUTHENIUM COMPLEXES ON THE OPTICAL PROPERTIES OF DUMBBELL-SHAPED COMPOUNDS

REF. REVISTA: *Chem.Eur.J.* **19**, pág. 1476-1488 (2013) CLAVE A

252

AUTORES: M. Moreno Oliva, R. Juarez, M. Ramos, J.L. Segura, S. van Cleuvenbergen, K. Clays, T. Goodson III, J. Casado, J. T. López Navarrete

TÍTULO: LINEAR AND NONLINEAR OPTICAL PROPERTIES OF RAMIFIED HEXAAZATRIPHENYLENES: DIPOLAR VERSUS OCTUPOLAR CONTRIBUTIONS

REF. REVISTA: *J.Phys.Chem. C.* **117**, pág. 626-632 (2013) CLAVE A

253

- AUTORES: J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, M. Algarra, D.A. da Silva, S. Yamaguchi, R. Rondao, J. Seixas de Melo, V. Navarro-Fuster, P.G. Boj, M. Diaz-García
- TÍTULO: AMPLIFIED SPONTANEOUS EMISSION IN PENTATHIENOACENE DIOXIDES BY DIRECT OPTICAL PUMP AND BY ENERGY TRANSFER: CORRELATION WITH PHOTOPHYSICAL PARAMETERS
- REF. REVISTA: *Adv.Opt.Mat.* **1**, pág. 588-599 (2013) CLAVE A
-

254

- AUTORES: J. Casado, P. Mayorga, F. J. Ramírez, J.T. López Navarrete, S. H. Lapidus, P. W. Stephens, H.-L. Vo, J. S. Miller, F. Mota, J. J. Novoa.
- TÍTULO: EVIDENCE FOR MULTICENTER BONDING IN DIANIONIC TETRACYANOETHYLENE DIMMERS BY RAMAN SPECTROSCOPY.
- REF. REVISTA: *Angew.Chem. Int Ed.*, **52**, pág 6421-6425 (2013) CLAVE A
-

255

- AUTORES: R. Ponce Ortiz, H. Herrera, M. J. Mancheño, C. Seoane, J. L. Segura, P. Mayorga Burrezo, J. Casado, J.T. López Navarrete, A. Facchetti, T. J. Marks
- TÍTULO: MOLECULAR AND ELECTRONIC STRUCTURE BASIS OF THE AMBIPOLAR BEHAVIOR OF NAPHTHALIMIDE-TERTHIOPHENE DERIVATIVES. IMPLEMENTATION IN OFETS
- REF. REVISTA: *Chem. Eur. J.*, **19**, pág 12458–12467 (2013) CLAVE A
-

256

- AUTORES: J.L. Zafra, R. Andreu, E. Galán, J. Orduna, J. Garín, J.M. Ortiz, J.T. López Navarrete, J. Casado
- TÍTULO: INTERPRETATION OF INFRARED AND RAMAN SPECTRA OF ZWITTERIONIC PUSH-PULL DYES BASED ON QUINOIDAL THIAZOLE
- REF. REVISTA: *J.Mol.Struct.*, **1044**, pág 55-60 (2013) CLAVE A
-

257

- AUTORES: M. Souto, J. Guasch, V. Lloveras, P. Mayorga, J. T. López Navarrete, J. Casado, I. Ratera, C. Rovira, A. Painelli, J. Veciana
- TÍTULO: THERMOMAGNETIC MOLECULAR SYSTEM BASED ON TTF-PTM RADICAL: SWITCHING THE SPIN AND CHARGE DELOCALIZATION
- REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. Lett.*, **4**, pág 2721–2726 (2013) CLAVE A
-

258

- AUTORES: M. K. Poduval, P. Mayorga Burrezo, J. Casado, J. T. López Navarrete, R. Ponce Ortiz, T.-H. Kim
- TÍTULO: NOVEL THIOPHENE-PHENYLENE-THIOPHENE FUSED BISLACTAM-BASED DONOR-ACCEPTOR TYPE CONJUGATE POLYMERS: SYNTHESIS BY DIRECT ARYLATION AND PROPERTIES
- REF. REVISTA: *Macromolecules*, **46**, pág 9220–9230 (2013) CLAVE A

259

AUTORES: N. S. Rizalman, C. Capel Ferrón, W. Niu, Arthur L. Wallace, M. He, R. Balster, J. Lampkin, V. Hernández, J. T. López Navarrete, M. C. Ruiz Delgado, F. Hartl.
TÍTULO: RADICAL CATIONS OF END-CAPPED TETRATHIENOACENES AND THEIR π -DIMERIZATION CONTROLLED BY THE NATURE OF α -SUBSTITUENTS AND COUNTERION CONCENTRATION
REF. REVISTA: *RSC Adv.*, **3**, pág. 25644-25647 (2013) CLAVE A

260

AUTORES: X. Guo, N. Zhou, S. J. Lou, J. Smith, D. B. Tice, J. Hennek, R. Ponce Ortiz, J.T. López Navarrete, S. Li, J. Strzalka, L. X. Chen, R. P. H. Chang, A. Facchetti, T.J. Marks
TÍTULO: POLYMER SOLAR CELLS WITH ENHANCED FILL FACTORS
REF. REVISTA: *Nature Photonics* **7**, 825-833 (2013) CLAVE A

261

AUTORES: F.J. Ramírez, B. Nieto-Ortega, J. Casado, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: THE FIRST CHIRAL RAMAN SPECTRUM REPORT OF A PROTEIN. A PERSPECTIVE OF 20 YEARS
REF. REVISTA: *Chem. Comm.* **49**, pág. 8893-8895 (2013) CLAVE A

262

AUTORES: D. Janeliunas, R. Eelkema, B. Nieto-Ortega, F.J. Ramírez, J.T. López Navarrete, L. van der Mee, M.C.A. Stuart, J. Casado, J.H. van Esch
TÍTULO: DESIGNING NEW SYMMETRICAL FACIAL OLIGOTHIOPHENE AMPHIPHILES
REF. REVISTA: *Org. Biomol. Chem.* **11**, pág. 8435-8442 (2013) CLAVE A

263

AUTORES: F. S. U. Fischer, K. Tremel, A.-K. Saur, S. Link, N. Kayunkid, M. Brinkmann, D. Herrero-Carvajal, J. T. López Navarrete, M. C. Ruiz Delgado, and S. Ludwigs
TÍTULO: INFLUENCE OF PROCESSING SOLVENTS ON OPTICAL PROPERTIES AND MORPHOLOGY OF A SEMICRYSTALLINE LOW BANDGAP POLYMER IN THE NEUTRAL AND CHARGED STATES
REF. REVISTA: *Macromolecules*, **46**, pág. 4924-4931 (2013) CLAVE A

264

AUTORES: S.M. Link, M. Scheuble, M. Goll, E. Muks, A. Ruff, A. Hoffmann, T.V. Richter, J.T. Lopez Navarrete, M.C. Ruiz Delgado, S. Ludwigs
TÍTULO: ELECTROPOLYMERIZED THREE-DIMENSIONAL RANDOMLY BRANCHED EDOT-CONTAINING COPOLYMERS
REF. REVISTA: *Langmuir*, **29**, pág. 15463-15473 (2013) CLAVE A

265

- AUTORES: Z. Zeng, S. Lee, J.L. Zafra, M. Ishida, X. Zhu, Z. Sun, Y. Ni, R.D. Webster, R.-W. Li, J.T. López Navarrete, C. Chi, J. Ding, J. Casado, D. Kim, J. Wu
- TÍTULO: TETRACYANOQUATERRYLENE AND TETRACYANOHEXARYLENEQUINODIMETHANES WITH TUNABLE GROUND STATES AND STRONG NEAR-INFRARED ABSORPTION
- REF. REVISTA: *Angew. Chem. Int. Ed.* 2013, **52**, 8561–8565 CLAVE A
-

266

- AUTORES: Z. Zeng, M. Ishida, J.L. Zafra, X. Zhu, Y. Mo Sung, N. Bao, R. D. Webster, B. S. Lee, R.-W. Li, W. Zeng, Y. Li, C. Chi, J.T. López Navarrete, J. Ding, J. Casado, D. Kim, J. Wu
- TÍTULO: PUSHING EXTENDED P- QUINODIMETHANES TO THE LIMIT: STABLE TETRACYANO-OLIGO(N- ANNULATED PERYLENE) QUINODIMETHANES WITH TUNABLE GROUND STATES
- REF. REVISTA: *J. Am. Chem. Soc.* 2013, **135**, 6363–6371 CLAVE A
-

267

- AUTORES: A.B. Marco, R. Andreu, S. Franco, J. Garín, J. Orduna, B. Villacampa, B.E. Diosdado, J.T. López Navarrete, J. Casado
- TÍTULO: PUSH-PULL SYSTEMS BEARING A QUINOID/AROMATIC THIENO[3,2-b]THIOPHENE MOIETY: SYNTHESIS, GROUND STATE, POLARIZATION AND SECOND-ORDER NONLINEAR PROPERTIES
- REF. REVISTA: *Org. Biomol. Chem.* **11**, pág. 6338-6349 (2013) CLAVE A
-

268

- AUTORES: R. C. González-Cano, G. Saini, J. Jacob, J. T. López Navarrete, J. Casado, M. C. Ruiz Delgado
- TÍTULO: INTERPLAY OF α,α - VERSUS α,β -CONJUGATION IN THE EXCITED STATES AND CHARGED DEFECTS OF BRANCHED OLIGOTHIOPHENES AS MODELS FOR DENDRIMERIC MATERIALS.
- REF. REVISTA: *Chem Eur J.* **19**, pág. 17165-17171 (2013) CLAVE A
-

269

- AUTORES: T. Lupión, C. Criado, J.T. López Navarrete, J. Quirante.
- TÍTULO: CELEBRANDO EN MÁLAGA EL 2011 AIQ
- REF. REVISTA: *An.Quím.* **109**, pág. 59-63. (2013). CLAVE R
-

270

- AUTORES: H. Huang, N. Zhou, R. Ponce Ortiz, Z. Chen, S. Loser, S. Zhang, X. Guo, J. Casado, J.T. López Navarrete, X. Yu, A. Facchetti, T.J. Marks
- TÍTULO: ALKOXY-FUNCTIONALIZED THIENYL-VINYLENE POLYMERS FOR FIELD-EFFECT TRANSISTORS AND ALL-POLYMER SOLAR CELLS
- REF. REVISTA: *Adv. Funct. Mater.* Aceptado para publicación CLAVE A
-

271

- AUTORES: F. Aparicio, B. Nieto-Ortega, F. Nájera, J. Casado, F.J. Ramírez, J.T. López Navarrete, J. Casado, L. Sánchez.

TITULO: INVERSION OF SUPRAMOLECULAR HELICITY IN OLIGO-P-PHENYLENE-BASED SUPRAMOLECULAR POLYMERS. INFLUENCE OF MOLECULAR ATROPISOMERISM

REF. REVISTA: *Angewandte Chem. Int. Ed* Accepted CLAVE A

272

AUTORES: B. Nieto-Ortega, J. M. Hierrezuelo, C. Carnero Ruiz, J.T. López Navarrete, J. Casado, F.J. Ramírez.

TITULO: THE UNFOLDING PATHWAY OF A GLOBULAR PROTEIN BY SURFACTANTS IS MONITORED WITH RAMAN OPTICAL ACTIVITY

REF. REVISTA: *J. Phys. Chem. Lett.* **5**, pág. 8-13 (2014) CLAVE A

**Estancias en centros extranjeros
(superiores a un mes)**

CLAVE D = doctorando, P = postdoctoral, I = invitado, C = contratado.

CENTRO: Politecnico di Milano. Dipartimento di Chimica Industriale.

LOCALIDAD: Milán (ITALIA).

FECHA, DURACION: Del 1-10-1986 al 30-9-1988. 2 Años.

TEMA: Becario Postdoctoral en el Extranjero del M.E.C. Estudios vibracionales sobre polímeros conductores.

CLAVE: P

CENTRO: Politecnico di Milano. Dipartimento di Chimica Industriale.

LOCALIDAD: Milán (ITALIA).

FECHA, DURACION: Del 1-4-1990 al 31-5-1990. 2 meses.

TEMA: Ayuda Junta de Andalucía. Estudios vibracionales y electrónicos sobre polímeros conductores.

CLAVE: I

Tesis Doctorales dirigidas o en fase de realización (DEA finalizado)

Título de Tesis: Espectros vibracionales y dinámica reticular de polímeros conductores: Polifurano y Poli(3-metiltiofeno).
Doctorando: Víctor Hernández Jolín
Universidad: Málaga
Facultad: Ciencias
Fecha: 25/10/1991
Calificación: Apto "cum laude" y Premio Extraordinario de Doctorado

Título de Tesis: Espectroscopía vibracional de sistemas policonjugados: α -oligotiofenos en estados neutro y oxidado
Doctorando: Juan Casado Cordón
Universidad: Málaga
Facultad: Ciencias
Fecha: 14/04/1999
Calificación: Sobresaliente "cum laude" y Premio Extraordinario de Doctorado

Título de Tesis: Oligotiofenos funcionalizados simétrica o asimétricamente con aplicaciones en optoelectrónica: estudio espectroscópico y teórico.
Doctorando: M. Carmen Ruiz Delgado

Universidad: Málaga
Facultad: Ciencias
Fecha: 27/06/2006
Calificación: Sobresaliente “cum laude” y Premio Extraordinario de Doctorado
Publicada por el Servicio de Publicaciones de la Universidad de Málaga ISBN: 84-690-3322-0

Título de Tesis: Estudio espectroscópico, electroquímico, espectroelectroquímico y químico-cuántico de oligotiofenos quinoides con aplicaciones en FETs.
Doctorando: Rocío Ponce Ortiz
Universidad: Málaga
Facultad: Ciencias
Fecha: 27/02/2008
Calificación: Sobresaliente “cum laude” y Premio Extraordinario de Doctorado

Título de Tesis: Acenos y Heteroacenos para electrónica orgánica: estudio espectroscópico, electroquímico y teórico.
Doctorando: Reyes Malavé Osuna
Universidad: Málaga
Facultad: Ciencias
Fecha: 09/07/2009
Calificación: Sobresaliente “cum laude” y Premio Extraordinario de Doctorado

Título de Tesis: Moléculas Octopolares conjugadas: propiedades ópticas lineales y no lineales mediante espectroscopía y química cuántica.
Doctorando: María Moreno Oliva
Universidad: Málaga
Facultad: Ciencias
Fecha: 17/06/2011
Calificación: Sobresaliente “cum laude” y Premio Extraordinario de Doctorado

Título de Tesis: Evaluación de la deslocalización de carga en semiconductores orgánicos basados en oligotiofenos mediante espectroscopia Raman: p-dimeros, especies polarónicas y sistemas de valencia mixta
Doctorando: Sandra Rodríguez González
Universidad: Málaga
Facultad: Ciencias
Fecha: 25/09/2012
Calificación: Sobresaliente “cum laude” y Premio Extraordinario de Doctorado

Título de Tesis: Evaluación de la deslocalización de carga en semiconductores orgánicos basados en oligotiofenos mediante espectroscopia Raman: p-dimeros, especies polarónicas y sistemas de valencia mixta
Doctorando: Cristina Capel Ferrón
Universidad: Málaga

Facultad: Ciencias
 Fecha: 03/12/2013
 Calificación: Sobresaliente “cum laude”

Título de DEA: Espectroscopías Quiro-ópticas aplicadas a la conformación molecular y supramolecular: compuestos ambifílicos y porfirinas quirales.
 Doctorando: Belen Nieto Ortega
 Universidad: Málaga
 Facultad: Ciencias
 Calificación: DEA (diciembre de 2010). Sobresaliente.

Título de DEA: Oligotiofenos en electrónica molecular: Análisis de las propiedades espectroscópicas
 Doctorando: José Luis Zafra Paredes
 Universidad: Málaga
 Facultad: Ciencias
 Calificación: DEA (septiembre de 2011). Sobresaliente.

Título de DEA: Oligotiofenos pro-dendriméricos: Espectroscopía Raman Resonante y química Cuántica
 Doctorando: Rafael C. González Cano
 Universidad: Málaga
 Facultad: Ciencias
 Calificación: DEA (septiembre de 2011). Sobresaliente.

Título de DEA: Transición de bipolarón a par polarónico en oligotiofenos de diferente tamaño y forma: estructura molecular por espectroscopía Raman
 Doctorando: Paula Mayorga Burrezo
 Universidad: Málaga
 Facultad: Ciencias
 Calificación: DEA (junio de 2012). Sobresaliente.

Organización y gestión de actividades y servicios de I+D

-
- Responsable del Servicio de Espectroscopia Vibracional de los Servicios Centrales de Apoyo a la Investigación de la Universidad de Málaga, desde septiembre de 1995 hasta la actualidad.
 - Miembro electo de la Comisión de Investigación de la Universidad de Málaga (representante de la Facultad de Ciencias), desde 1 de febrero de 1997 hasta la actualidad.
 - Presidente de la Sección Territorial de Málaga de la Real Sociedad Española de Química. Desde febrero de 2005 hasta la actualidad
 - Vicepresidente del Grupo Especializado *Nanociencia y Materiales Moleculares*. Real Sociedad Española de Química. Desde abril de 2005 hasta diciembre de 2008.

- Presidente del Comité Organizador de la *VIII Escuela Nacional de Materiales Moleculares. Reunión Nacional de Grupo Especializado de Nanociencia y Materiales Moleculares (RSEQ y RSEF)*. Celebrada en Estepona (Málaga), del 20 al 27 de mayo de 2007.
- Vicepresidente del Comité Interno de Evaluación (CIE) de los Servicios Centrales de Apoyo a la Investigación de la Universidad de Málaga, participante en el proceso de evaluación institucional (convocatoria de 2005) del Plan Andaluz de la Calidad de las Universidades Andaluzas. Desde el 4 de noviembre de 2005 hasta la actualidad.
- Director de los Servicios Centrales de Apoyo a la Investigación (SCAI) de la Universidad de Málaga, desde 01/02/2004 hasta 26/01/2012.
- Director de Secretariado de Estructuras de Apoyo a la Investigación de la Universidad de Málaga, desde 27/01/2012 hasta la actualidad.
- Vocal del Comité Científico de la *XXXII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química*. Oviedo, 13-18 septiembre de 2009.
- Adjunto a la Coordinación del Área de Química de la Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva (ANEP) del Ministerio de Ciencia e Innovación. Desde 1 de noviembre de 2008 hasta 31 de diciembre de 2011.
- Director del Curso de Verano de la Universidad de Málaga “*La revolución de la nanociencia: contribución a los nuevos materiales y la biomedicina*”. Ronda (Málaga), 13-17 de julio de 2009 (10 conferencias, 4 mesas redondas, 20 horas lectivas).
- Miembro del *Scientific Committee* del “*International Workshop on Molecular Materials*”, 2-5 de mayo de 2010. Sanxenxo (Pontevedra).
- Miembro del *Local Advisory Board* de la “*European Conference on Molecular Electronics (ECME2011)*” 7-10 septiembre 2011. Barcelona (España).
- Miembro del Comité Científico de *VIII Simposio de Investigadores Jóvenes de la Real Sociedad Española de Química*, 25-28 octubre 2011. Torremolinos (Málaga).

Cursos de postgrado

- Invitación y Gestión de la visita como Profesor Invitado del Dr. Gianni Zotti (Instituto CNR para la Energética y las interfases, Padova, Italia) en la asignatura “Métodos espectroscópicos en la caracterización de materiales poliméricos y biopolímeros”, del Master Oficial de Postgrado (mención de calidad). Curso 2006-2007, 3 semanas.
- Invitación y Gestión de la solicitud para la participación como Profesor Invitado del Dr. Demetrio Da Silva (Georgia Institute of Technology, Atlanta, USA) en la asignatura “Métodos espectroscópicos en la caracterización de materiales poliméricos y biopolímeros”, del Master Oficial de Postgrado (mención de calidad). Curso 2007-2008, 1 semana.
- Invitación y preparación de la visita como Profesor Invitado del Dr. Antonio Facchetti (Northwestern University, Evanston, USA) en la asignatura “Métodos espectroscópicos en la caracterización de materiales poliméricos y biopolímeros”, del Master Oficial de Postgrado (mención de calidad). Curso 2008-2009, 1 semana.

Titulaciones Propias

- I Curso Supervisores Instalaciones Radiactivas
UNIVERSIDAD DE MÁLAGA
Director Académico: Juan T. López Navarrete
Código: 81528815001-4
Fecha: 07/06/2010 - 22/06/2010.
Horas: 58

- I Curso Operadores Instalaciones Radiactivas
UNIVERSIDAD DE MÁLAGA
Director Académico: Juan T. López Navarrete
Código: 81531815001-0
Fecha: 15/11/2010 - 29/11/2010
Horas: 40

- II Curso Supervisores Instalaciones Radiactivas
UNIVERSIDAD DE MÁLAGA
Director Académico: Juan T. López Navarrete
CÓdigo: 81533815001-2
Fecha: 16/05/2011 - 31/05/2011
Horas: 60

- II Curso Operadores Instalaciones Radiactivas
UNIVERSIDAD DE MÁLAGA
Director Académico: Juan T. López Navarrete
Código: 81532815001-1
Fecha: 4/07/2011 - 15/07/2011
Horas: 40

- I Curso Directores Instalaciones Radiodiagnóstico Médico
UNIVERSIDAD DE MÁLAGA
Director Académico: Juan T. López Navarrete
Código: 81535815001-4
Fecha: 14/11/2011 - 19/11/2011
Horas: 100; 4 créditos ECTS

- I Curso Operadores Instalaciones Radiodiagnóstico Médico
UNIVERSIDAD DE MÁLAGA
Director Académico: Juan T. López Navarrete
Código: 81536815001-5
Fecha: 14/11/2011 - 19/11/2011
Horas: 100; 4 créditos ECTS

- II Curso Directores Instalaciones Radiodiagnóstico Médico
UNIVERSIDAD DE MÁLAGA
Director Académico: Juan T. López Navarrete
Fecha: 14/11/2011 - 19/11/2011
Horas: 100; 4 créditos ECTS

- II Curso Operadores Instalaciones Radiodiagnóstico Médico
 UNIVERSIDAD DE MÁLAGA
 Director Académico: Juan T. López Navarrete
 Fecha: 16/17/2012 - 20/07/2012
 Horas: 100; 4 créditos ECTS

Contribuciones a Congresos

Conferencias o Comunicaciones Orales Seleccionadas o Invitadas

- | | |
|-----------|--|
| AUTORES: | J.T. López Navarrete, G. Zerbi. |
| TÍTULO: | Polimeri Conduttori: Interpretazione dello Spettro Vibrazionale delle Speci Fotoindotte nel Poliacetilene |
| TIPO : | Comunicación Oral. |
| CONGRESO: | XIII Convegno Italiano di Scienze delle Macromolecole. |
| LUGAR: | Milán (ITALIA). |
| AÑO: | 1987. |
| AUTORES: | G. Zerbi, M. Gussoni, C. Castiglioni, B.Tian, J.T. López Navarrete. |
| TÍTULO: | Vibrational Spectroscopy of Oligoenes and of Polyconjugated Conducting Polymers. |
| TIPO: | Conferencia Plenaria invitada PL 09. |
| CONGRESO: | XIXth European Congress on Molecular Spectroscopy. |
| LUGAR: | Dresde (ALEMANIA). |
| AÑO: | 1989. |
| AUTORES: | G. Zerbi, C. Castiglioni, M. Gussoni, J.T. López Navarrete, B.Tian. |
| TÍTULO: | Effective Coordinate and Vibrational Spectra of Polyconjugated Systems. |
| TIPO: | Comunicación Oral OPT 1. |
| CONGRESO: | International Winterschool on Electronic Properties of Polymers and Related Compounds. |
| LUGAR: | Kirchberg (AUSTRIA). |
| AÑO: | 1989. |
| AUTORES: | G. Zerbi, M. Gussoni, C. Castiglioni, J.T. López Navarrete, B.Tian. |
| TÍTULO: | Effective Coordinate Theory and The Vibrational Spectra of Conducting Polymers. |
| TIPO: | Comunicación Oral S9 2. |
| CONGRESO: | 1989 March Meeting of The American Physical Society. |
| LUGAR: | San Luis (U.S.A.). |
| AÑO: | 1989. |
| AUTORES: | J. Soto, V. Hernández, J.T. López Navarrete. |
| TÍTULO: | Conformational study and Lattice Dynamics of Poly(p-phenylene): Oligomers and Polymer. |
| TIPO: | Conferencia invitada G.II.4. |
| CONGRESO: | European Materials Research Society 1991 Fall Meeting. |
| LUGAR: | Strasbourg (FRANCIA). |
| AÑO: | 1991. |
| AUTORES: | V. Hernández, F.J. Ramírez, J.T. López Navarrete. |
| TÍTULO: | Comparison between Semiempirical and Experimental Force Fields of Oligothiophenes as an approach for the Calculation of the Vibrational Spectrum of the Polymer. |
| TIPO: | Conferencia invitada C 6.8. |
| CONGRESO: | XXI European Congress on Molecular Spectroscopy. |
| LUGAR: | Viena (AUSTRIA). |

AÑO: 1992.

AUTORES: V. Hernández, J. Soto, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Vibrational Spectra and Lattice Dynamics Calculations of Poly(p-phenylene):
 Oligomers and Polymer.
 TIPO: Conferencia invitada O 37.
 CONGRESO: **International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals.**
 LUGAR: Gotemburgo (SUECIA).
 AÑO: 1992.

AUTORES: J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Aportaciones de la espectroscopía vibracional y de los cálculos de dinámica
 reticular al estudio de los polímeros conductores. Parte I: Fundamentos teóricos.
 TIPO: Conferencia invitada.
 CONGRESO: **I Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: Peñíscola (Castellón de la Plana).
 AÑO: 1992.

AUTORES: J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Aportaciones de la espectroscopía vibracional y de los cálculos de dinámica
 reticular al estudio de los polímeros conductores. Parte I I: Aplicaciones.
 TIPO: Conferencia invitada.
 CONGRESO: **I Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: Peñíscola (Castellón de la Plana).
 AÑO: 1992.

AUTORES: V. Hernández, F.J. Ramírez, J. Casado, F. Enríquez, J.J. Quirante, J.T. López
 Navarrete.
 TÍTULO: Ab Initio RHF/6-31G** Theoretical Study of Thiophene Derivatives: 2-Methyl and 3-
 Methyl Thiophene.
 TIPO: Comunicación Oral invitada OA06.
 CONGRESO: **XXIII European Congress on Molecular Spectroscopy.**
 LUGAR: Lago Balatón (HUNGRÍA).
 AÑO: 1996.

AUTORES: J.T. López Navarrete, V. Hernández, F.J. Ramírez.
 TÍTULO: Análisis comparativo de la estructura y espectros vibracionales de ácido aspártico y
 ácido aspártico dipéptido.
 TIPO: Comunicación Oral 53.
 CONGRESO: **XV Reunión Nacional de Espectroscopía.**
 LUGAR: Oviedo.
 AÑO: 1996.

AUTORES: J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Estructuras y propiedades ópticas de materiales policonjugados a partir
 de sus espectrosvibracionales: Espectroscopía IR y Raman de Oligotiofenos.
 TIPO: Conferencia invitada.
 CONGRESO: **IV Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: El Escorial (Madrid)
 AÑO: 1999

AUTORES: J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Estructuras y propiedades ópticas de oligómeros conjugados
 TIPO: Conferencia invitada.
 CONGRESO: **V Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: Peñíscola (Castellón de la Plana)
 AÑO: 2001

- AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J. Casado, J.T. López Navarrete, J.M. Raimundo, P. Blanchard, J. Roncali.
- TÍTULO: Vibrational Study of Push-Pull Chromophores for Second-Order Nonlinear Optics derived from Rigidified Thiophene-based π -Conjugating Spacers.
- TIPO: Comunicación Oral invitada.
- CONGRESO: **XXVI European Congress on Molecular Spectroscopy.**
- LUGAR: Lille (Francia).
- AÑO: 2002.
-
- AUTORES: J.T. López Navarrete.
- TÍTULO: Estructuras, espectroscopias ópticas y espectroelectroquímica de oligómeros policonjugados.
- TIPO: Conferencia invitada.
- CONGRESO: **VI Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
- LUGAR: Cartagena (Murcia)
- AÑO: 2003
-
- AUTORES: S. Delgado Ledesma, R. Ponce Ortiz, M.C. Ruiz Delgado, Y. Vida, E. Pérez-Inestrosa, J. Casado, V. Hernández, O-K. Kim, J.-M. Lehn, J.T. López Navarrete.
- TÍTULO: Quantum-Chemical (DFT and TDDFT) and Vibrational Study of Push-Pull Chromophores for Second Order-Nonlinear Optics Devices.
- TIPO: Comunicación Oral.
- CONGRESO: **4th Workshop of conjugated oligomers and polymers from synthesis to electronic function**
- LUGAR: Blauberen, Ulm (Alemania).
- AÑO: 2003.
-
- AUTORES: Mari Carmen Ruiz Delgado, Víctor Hernández, Rocio Ponce Ortiz, Juan T. López Navarrete, Shoji Tanaka, and Yoshiro Yamashita.
- TÍTULO: Vibrational Spectroscopy and theoretical study of narrow-bandgap heterocyclic cooligomers containing alternating aromatic-donor and o-quinoid-acceptor units.
- TIPO: Comunicación Oral.
- CONGRESO: **4th Workshop of conjugated oligomers and polymers from synthesis to electronic function**
- LUGAR: Blauberen, Ulm (Alemania).
- AÑO: 2003.
-
- AUTORES: Juan Casado Cordón, Víctor Hernández Jolín, Juan T. López Navarrete.
- TÍTULO: Quinoid Oligothiophenes: From Amphoteric Molecules to Transistor Devices.
- TIPO: Comunicación Oral invitada.
- CONGRESO: **CERC3 Young Chemist's workshop in nanoscience: from chemistry and molecular microscopy to design of functional materials**
- LUGAR: Goteborg (Suecia).
- AÑO: 2003.
-
- AUTORES: Juan Casado Cordón, Ted M. Pappenfus, Víctor Hernández Jolín, Juan T. López Navarrete.
- TÍTULO: Claves electroquímicas para la aplicación de oligotiofenos en electrónica. De moléculas anfóteras a materiales bipolares.
- TIPO: Comunicación Oral.
- CONGRESO: **XXVI Reunión Bienal del Grupo de Electroquímica de la RSEQ. VII Iberic Meeting of Electrochemistry**
- LUGAR: Córdoba (España).
- AÑO: 2004.
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, M. C. Ruiz Delgado, J. Casado, V. Hernández, O-K. Kim, J. T. López Navarrete.

- TÍTULO: *In situ* spectroelectrochemical and quantum chemical DFT study of some D- π -D chromophores bearing dithienothiophene, DTT, as π -center, and showing unusual amphoteric redox properties.
- TIPO: Conferencia invitada.
- CONGRESO: **Internacional Conference on Synthetic Metals ICSM2004**
- LUGAR: Wollongong (Australia).
- AÑO: 2004.
-
- AUTORES: J.T. López Navarrete.
- TÍTULO: Espectroscopia vibracional de materiales moleculares.
- TIPO: Conferencia invitada.
- CONGRESO: **VII Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
- LUGAR: Boí-Taull (Lérida).
- AÑO: 2005
-
- AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, R. Ponce Ortiz, M. Moreno Oliva, J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, E. Ortí, P.M. Viruela, K. Takimiya, T. Otsubo
- TÍTULO: Physiscal and photophysical studies on long quinoidal oligothiophenes. A Raman Spectroscopic and theoretical analysis.
- TIPO: Comunicación oral invitada.
- CONGRESO: **XX Reunión Nacional de Espectroscopía**
- LUGAR: Ciudad Real
- AÑO: 2006
-
- AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, R. Malavé Osuna, J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, Y. Sakamoto, S. Komatsu, T. Suzuki, M. Kobayashi, Y. Gao, Y. Fukai, D. A. da Silva Filho, J.-L. Brédas
- TÍTULO: Perfluorination of Tetracene: Raman Study and Charge Transport Properties Aided by Quantum-Chemical Calculations.
- TIPO: Comunicación oral invitada.
- CONGRESO: **Symposium: Relativistic quantum theory: Computational perspectives and applications (ICCMSE 2006)**
- LUGAR: Creta (Grecia)
- AÑO: 2006
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete, J. A. Letizia, A. Facchetti, T. J. Marks.
- TÍTULO: Azine Functionalized Oligothiophenes: Synthesis, Optical and Semiconductor Properties. Molecular Basis of Their Behaviour.
- TIPO: Comunicación Oral.
- CONGRESO: **NZIC 2006: Back to the Basics.**
- LUGAR: Rotorua (Nueva Zelanda).
- AÑO: 2006
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, S. Rodríguez González, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete, J. A. Letizia, A. Facchetti, T. J. Marks.
- TÍTULO: Azine Functionalized Oligothiophenes as Semiconductor for OFETS. Molecular Basis of Their Electrical Behaviour.
- TIPO: Comunicación Oral.
- CONGRESO: **Biomimetics, Artificial Muscles and Nano-Bio 2007**
- LUGAR: Cartagena (España)
- AÑO: 2007.
-
- AUTORES: J.T. López Navarrete.
- TÍTULO: Espectroscopia Raman aplicada a materiales moleculares.
- TIPO: Conferencia invitada.
- CONGRESO: **IX Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
- LUGAR: Peñíscola (Castellón)

AÑO: 2008

AUTORES: J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Espectroscopia Raman aplicada a materiales moleculares.
 TIPO: Conferencia invitada.
 CONGRESO: **X Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: Elche (Alicante)
 AÑO: 2009

AUTORES: J. Casado, S. Rodríguez González, J. T. López Navarrete,
 TÍTULO: A Polaron Pair is More than a Bipolaron.
 TIPO: Comunicación Oral.
 CONGRESO: **International Workshop on Molecular Materials**
 LUGAR: Sanxenxo (Pontevedra)
 AÑO: 2010

AUTORES: J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Espectroscopia Raman de derivados de carbono
 TIPO: Conferencia invitada.
 CONGRESO: **XI Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: Peñafiel (Valladolid)
 AÑO: 2010

AUTORES: J. Casado, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Molecular Biradicals: Toward Functional Nano-Scale Biradicals
 TIPO: Conferencia invitada.
 CONGRESO: **Nanospain Conference-International Workshop on Nanomedicine**
 LUGAR: Málaga
 AÑO: 2010

AUTORES: J. Casado, S. Rodríguez González, R. Ponce Ortiz, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Oligothiophenes with Unconventional Electronic Structures
 TIPO: Conferencia invitada.
 CONGRESO: **III SEEDMOL**
 LUGAR: Brasilia (Brasil)
 AÑO: 2010

AUTORES: J. Casado, S. Rodríguez González, Y. Aso, Y. Ie, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Raman Evidence of the Biradicaloid Polaron-Pair in Long Oligothiophene Dications: Does it Exist in Doped Polythiophene?
 TIPO: Conferencia invitada.
 CONGRESO: **F- π -9: International Symposium on Functional π -Electron Systems**
 LUGAR: Atlanta (USA)
 AÑO: 2010

AUTORES: J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Espectroscopia Raman de materiales moleculares
 TIPO: Conferencia invitada.
 CONGRESO: **XII Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: Benicassim (Castellón)
 AÑO: 2011

AUTORES: J. Casado, S. Rodríguez González, R. Caballero, P. de la Cruz, M.C. Ruiz Delgado, J.T. López Navarrete, F. Langa
 TÍTULO: Extraordinary long borderline mixed valence systems based on π -conjugated diferrocenyl thiophene-vinylene oligomers: Raman proves a localized-to-delocalized charge transfer excitation.

TIPO: Conferencia invitada.
 CONGRESO: **F- π -10: International Symposium on Functional π -Electron Systems**
 LUGAR: Beijing (China)
 AÑO: 2011

AUTORES: J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Espectroscopia Raman de materiales moleculares
 TIPO: Conferencia invitada.
 CONGRESO: **XIII Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: El Escorial (Madrid)
 AÑO: 2012

AUTORES: J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Espectroscopia Raman de materiales moleculares
 TIPO: Conferencia invitada.
 CONGRESO: **XIV Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: Almagro (Ciudad Real)
 AÑO: 2013

Otros Seminarios y Conferencias

AUTORES: J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: La investigación en el campo de los nuevos materiales poliméricos.
 TIPO: Conferencia invitada.
 EVENTO: **I JORNADAS DE INGENIERÍA QUÍMICA**
 LUGAR: Málaga
 AÑO: 2004

AUTORES: J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Técnicas de caracterización en materiales moleculares nanoestructurados.
 TIPO: Conferencia invitada.
 EVENTO: **CURSOS DE VERANO DE LA UNIVERSIDAD DE MÁLAGA:
 “NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGÍA: UN FUTURO PRESENTE”**
 LUGAR: Ronda (Málaga)
 AÑO: 2007

AUTORES: J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Servicios de Investigación como instrumento de referencia entre los grupos de investigación y el tejido empresarial en el ámbito de influencia de la Universidad de Málaga.
 TIPO: Conferencia invitada.
 EVENTO: **CURSOS DE VERANO UNIVERSIDAD-EMPRESA (FUNDACIÓN OBSERVATORIO UNIVERSIDAD EMPRESA DE MÁLAGA:
 “APLICACIONES MEDIOAMBIENTALES DE LA ESPECTROMETRÍA ATÓMICA”**
 LUGAR: Málaga
 AÑO: 2008

AUTORES: J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Servicios de Investigación como instrumento de referencia entre los grupos de investigación y el tejido empresarial en el ámbito de influencia de la Universidad de Málaga.
 TIPO: Conferencia invitada.

- EVENTO: **CURSOS DE VERANO UNIVERSIDAD-EMPRESA (FUNDACIÓN OBSERVATORIO UNIVERSIDAD EMPRESA DE MÁLAGA: “PROTECCIÓN RADIOLÓGICA”**
- LUGAR: Málaga
AÑO: 2008
-
- AUTORES: J.T. López Navarrete.
TÍTULO: Jugando con los electrones de las moléculas: La nueva electrónica molecular
TIPO: Conferencia invitada.
EVENTO: **Asignatura “PERSPECTIVAS EN QUÍMICA”. 2º CICLO. LICENCIATURA DE QUÍMICA. UNIVERSIDAD DE VALLADOLID**
- LUGAR: Valladolid
AÑO: 2009
-
- AUTORES: J.T. López Navarrete.
TÍTULO: La organización y la proyección de la Nanociencia y Nanotecnología en el ámbito de los materiales y la biomedicina
TIPO: Conferencia invitada.
EVENTO: **CURSOS DE VERANO DE LA UNIVERSIDAD DE MÁLAGA: “LA REVOLUCIÓN DE LA NANOCIENCIA: CONTRIBUCIÓN A LOS NUEVOS MATERIALES Y LA BIOMEDICINA”**
- LUGAR: Ronda (Málaga)
AÑO: 2009
-
- AUTORES: J.T. López Navarrete.
TÍTULO: La investigación en la Universidad de Málaga
TIPO: Conferencia invitada.
EVENTO: **XXII Certamen Nacional de Jóvenes Investigadores**
- LUGAR: Mollina (Málaga)
AÑO: 2009
-
- AUTORES: J.T. López Navarrete.
TÍTULO: La investigación en los Servicios Centrales de Investigación de la Universidad de Málaga
TIPO: Conferencia invitada.
EVENTO: **XXIII Certamen Nacional de Jóvenes Investigadores**
- LUGAR: Mollina (Málaga)
AÑO: 2010
-
- AUTORES: J.T. López Navarrete.
TÍTULO: Raman Resonante en Moléculas y Compuestos de Carbono
TIPO: Conferencia invitada.
EVENTO: **CURSOS DE VERANO DE LA UNIVERSIDAD COMPLUTENSE: “ESPECTROSCOPIA RAMAN: CIENCIA DEL FUTURO PARA EL PRESENTE”**
- LUGAR: San Lorenzo del Escorial (Madrid)
AÑO: 2011
-

Mesas redondas

- Reunión de la “Red Catalana de Materiales Moleculares y propiedades eléctricas, magnéticas y ópticas”
Foro de discusión del programa de doctorado interuniversitario de Materiales Moleculares.
Institut de Ciència de Materials de Barcelona (CSIC).
Barcelona, 6-7 de julio de 2000.
-

- Sesión abierta de debate de la “Mesa de Trabajo del Área Estratégica de Investigación, Desarrollo Tecnológico e Innovación para la elaboración del **Plan Estratégico de la Universidad de Málaga 2004-2008**”
Málaga, 3 de octubre de 2005.

- Jornada científica de presentación del “Instituto de Ciencia Molecular” de la Universidad de Valencia.
La Ciencia Molecular: moléculas, supermoléculas y materiales.
Valencia, 1 de diciembre de 2000.

- Cursos de Verano de la Universidad de Málaga 2007. “Nanociencia y Nanotecnología: Un futuro presente”.
Mesa Redonda: “La perspectiva de la nanotecnología orgánica”
Ronda (Málaga), 10 de julio de 2007.

- Cursos de Verano de la Universidad de Málaga 2007. “Nanociencia y Nanotecnología: Un futuro presente”.
Mesa Redonda: “Nanociencia y Nanotecnología en la Universidad de Málaga”
Ronda (Málaga), 11 de julio de 2007.

Comunicaciones en paneles y comunicaciones orales cortas

AUTORES: J.F. Arenas, J.I. Marcos, J.T. López Navarrete, J.C. Otero
TÍTULO: Espectro Vibracional de pirazina-d₀ y Pirazina d₄.
TIPO: Comunicación Póster VR45.
CONGRESO: **IX Reunión Nacional de Espectroscopía-Congreso Ibérico de Espectroscopía.**
LUGAR: Salamanca y Coimbra (PORTUGAL). AÑO: 1983.

AUTORES: J.F. Arenas, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos, J.C. Otero
TÍTULO: A MINDO/3 Harmonic Force Field for Pyrazine
TIPO: Comunicación Póster 93.
CONGRESO: **XVIIth European Congress on Molecular Spectroscopy.**
LUGAR: Madrid. AÑO: 1985.

AUTORES: J.F. Arenas, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos, J.C. Otero
TÍTULO: Conformations and Vibrational Spectra of Methy-Pyrazines.
TIPO: Comunicación Póster 132.
CONGRESO: **XVIIth European Congress on Molecular Spectroscopy.**
LUGAR: Madrid. AÑO: 1985.

AUTORES: J.F. Arenas, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos, J.C. Otero, V. Hernández
TÍTULO: Espectro Vibracional y Estudio Configuracional de 3-Metilpiridazina.
TIPO: Comunicación Póster 46.
CONGRESO: **X Reunión Nacional de Espectroscopía.**
LUGAR: Málaga. AÑO: 1986.

AUTORES: J.F. Arenas, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos, J.C. Otero, J.J. Romero
TÍTULO: Campo de Fuerzas Canónico para Piridazina-h₄, 3,6-d₂, 4,5-d₂ y -d₄ a partir de MINDO/3.
TIPO: Comunicación Póster 47.
CONGRESO: **X Reunión Nacional de Espectroscopía.**
LUGAR: Málaga. AÑO: 1986.

AUTORES: J.F. Arenas, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos, J.C. Otero,
TÍTULO: Campo de Fuerzas Armónico para Dioxina a partir de MINDO/3.
TIPO: Comunicación Póster 48.
CONGRESO: **X Reunión Nacional de Espectroscopía.**
LUGAR: Málaga. AÑO: 1986.

- AUTORES: J.F. Arenas, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos, J.C. Otero,
 TÍTULO: Rotación Interna en 2,3-Dimetilpirazina.
 TIPO: Comunicación Póster 49.
 CONGRESO: **X Reunión Nacional de Espectroscopía.**
 LUGAR: Málaga. AÑO: 1986.
-
- AUTORES: G. Zerbi, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Lattice Dynamics of Polyacetylene
 TIPO: Comunicación Póster A-155.
 CONGRESO: **7th General Conference of the Condensed Matter Division of the European Physical Society.**
 LUGAR: Pisa (ITALIA). AÑO: 1987.
-
- AUTORES: C. Castiglioni, J.T. López Navarrete, M. Gussoni, G. Zerbi.
 TÍTULO: Interpretation of Infrared Spectra of Pristine and Doped Conducting Polymers.
 TIPO: Comunicación Póster 61.
 CONGRESO: **XVIIIth European Congress on Molecular Spectroscopy.**
 LUGAR: Amsterdam (HOLANDA). AÑO: 1987.
-
- AUTORES: J.F. Arenas, J.I. Marcos, J.T. López Navarrete, J.J. Romero.
 TÍTULO: Force Field for Out-of-Plane Vibrations of Pyridazine.
 TIPO: Comunicación Póster 161.
 CONGRESO: **XVIIIth European Congress on Molecular Spectroscopy.**
 LUGAR: Amsterdam (HOLANDA). AÑO: 1987.
-
- AUTORES: C. Castiglioni, M. Gussoni, J.T. López Navarrete, G. Zerbi.
 TÍTULO: FT-IR Spectra (Frequency and Intensity) of Conducting Polymers: Poly(paraphenylene).
 TIPO: Comunicación Póster A6-2.
 CONGRESO: **6th International Conference on Fourier Transform Spectroscopy.**
 LUGAR: Viena (AUSTRIA). AÑO: 1987.
-
- AUTORES: J.T. López Navarrete, G. Zerbi.
 TÍTULO: Proprietà Strutturali e Vibrazionali in Sistemi Coniugati e Polimeri Conduttori: Calcoli Quanto Meccanici.
 TIPO: Comunicación Póster 1-25.
 CONGRESO: **XXII Congresso Nazionale di Chimica Fisica.**
 LUGAR: Como (ITALIA). AÑO: 1987.
-
- AUTORES: J.T. López Navarrete, G. Zerbi.
 TÍTULO: Structure, Lattice Dynamics and Spectra of Pristine and Doped Polythiophene.
 TIPO: Comunicación Póster SUN P48.
 CONGRESO: **International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals.**
 LUGAR: Santa Fe (U.S.A.). AÑO: 1988.
-
- AUTORES: J.T. López Navarrete, G. Zerbi.
 TÍTULO: Clustering of Charge Carriers in Doped Electrically Conducting Polymers form the Raman Spectrum.
 TIPO: Comunicación Póster 14.26.
 CONGRESO: **XI International Conference on Raman Spectroscopy.**
 LUGAR: Londres (U.K.). AÑO: 1988.
-
- AUTORES: V. Hernández, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos.
 TÍTULO: Internal Rotation and Vibrational Properties of Polyfuran Oligomers.
 TIPO: Comunicación Póster 162.
 CONGRESO: **XIXth European Congress on Molecular Spectroscopy.**
 LUGAR: Dresde (ALEMANIA). AÑO: 1989.

- AUTORES: V. Hernández, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos.
 TÍTULO: Vibrational Spectra and Electronic Properties of Oligomers of polymethylthiophene.
 TIPO: Comunicación Póster 161.
 CONGRESO: **XIXth European Congress on Molecular Spectroscopy.**
 LUGAR: Dresde (ALEMANIA). AÑO: 1989.
-
- AUTORES: V. Hernández, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos.
 TÍTULO: Electronic Structure and Lattice Dynamics of Polyfuran.
 TIPO: Comunicación Póster POL.25.1
 CONGRESO: **International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals.**
 LUGAR: Tübingen (ALEMANIA). AÑO: 1990.
-
- AUTORES: J.F. Arenas, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos, J. Soto.
 TÍTULO: AM1 and MNDO Internal Rotation and Vibrational Properties of Poly(paraphenylene) and Poly(para-methylphenylenes) oligomers.
 TIPO: Comunicación Póster EP-02.
 CONGRESO: **II World Association of Theoretical Organic Chemist World Congress.**
 LUGAR: Toronto (CANADA). AÑO: 1990.
-
- AUTORES: V. Hernández, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos.
 TÍTULO: Conformational and Vibrational Properties of Poly(3-methylthiophene).
 TIPO: Comunicación Póster TH.2.17.
 CONGRESO: **International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals.**
 LUGAR: Tübingen (ALEMANIA). AÑO: 1990.
-
- AUTORES: V. Hernández, J.T. López Navarrete, J.I. Marcos.
 TÍTULO: Espectro Vibracional de Oligómeros de Polímeros Conductores: Poliaromáticos.
 TIPO: Comunicación Póster VR 12.
 CONGRESO: **XII Reunión Nacional de Espectroscopía.**
 LUGAR: Barcelona. AÑO: 1990.
-
- AUTORES: V. Hernández, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Lattice Dynamics and Vibrational Spectra of Pristine, Doped and Photoexcited Poly(3-methylthiophene).
 TIPO: Comunicación Póster G.P25.
 CONGRESO: **European Materials Research Society 1991 Fall Meeting.**
 LUGAR: Strasbourg (FRANCIA). AÑO: 1991.
-
- AUTORES: F.J. Ramírez, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Conformational and Vibrational Study on 1,2-didroxybenzene.
 TIPO: Comunicación Póster D6.4.
 CONGRESO: **XXI European Congress on Molecular Spectroscopy.**
 LUGAR: Viena (AUSTRIA). AÑO: 1992.
-
- AUTORES: J.T. López Navarrete, J.J. Quirante, F.J. Ramírez.
 TÍTULO: Harmonic Force Field for Amino Acid L-Glutamine by MNDO Semiempirical Method.
 TIPO: Comunicación Póster D6.5.
 CONGRESO: **XXI European Congress on Molecular Spectroscopy.**
 LUGAR: Viena (AUSTRIA). AÑO: 1992.
-
- AUTORES: V. Hernández, F.J. Ramírez, G. Zotti, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Resonance Raman Spectra and Lattice Dynamics Calculations of Pristine and Doped Polyconjugated Polyfuran.
 TIPO: Comunicación Póster T 9, T.
 CONGRESO: **International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals.**
 LUGAR: Gotemburgo (SUECIA). AÑO: 1992.
-

- AUTORES: J.T. López Navarrete, J.J. Quirante, F.J. Ramírez.
 TÍTULO: Estudio Comparativo de Geometrías, Frecuencias Vibracionales y Constantes de Fuerza para la Molécula de Glicina por Métodos Semiempíricos.
 TIPO: Comunicación Póster 16-C-5.
 CONGRESO: **XXIV Reunión Bienal de la RSEQ.**
 LUGAR: Málaga. AÑO: 1992.
-
- AUTORES: J.T. López Navarrete, L. Bencivenni, F. Ramondo, F.J. Ramírez.
 TÍTULO: Estudio Teórico por Métodos Semiempíricos y Ab Initio del Acido Glutámico en Forma Libre.
 TIPO: Comunicación Póster 98.
 CONGRESO: **XXI Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.**
-
- AUTORES: V. Hernández, J.T. López Navarrete, G. Zotti, M. Veronelli, G. Zerbi.
 TÍTULO: Lattice Dynamics and Vibrational Spectra of Polyfuran: Effective Conjugation Coordinate and Photoexcited Spectrum.
 TIPO: Comunicación Póster Mon.P51.
 CONGRESO: **International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals.**
 LUGAR: Seoul (Korea). AÑO: 1994.
-
- AUTORES: J. Casado, F.J. Ramírez, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Vibrational Spectra and Assignments of Amino Acid L-Asparagine.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XXII European Congress on Molecular Spectroscopy.**
 LUGAR: Essen (ALEMANIA). AÑO: 1994.
-
- AUTORES: F.J. Ramírez, V. Hernández, G. Zotti, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: A Semiempirical Approach for the Calculation of the Vibrational Spectra of Conducting Polymers: the case of Polyselenophene.
 TIPO: Comunicación Póster Mo.39.
 CONGRESO: **XXII European Congress on Molecular Spectroscopy.**
 LUGAR: Essen (ALEMANIA). AÑO: 1994.
-
- AUTORES: J.T. López Navarrete, V. Hernández, F.J. Ramírez.
 TÍTULO: Vibrational Study of Aspartic Acid and Glutamic Acid Dipeptides.
 TIPO: Comunicación Póster Tu.8.
 CONGRESO: **XXII European Congress on Molecular Spectroscopy.**
 LUGAR: Essen (ALEMANIA). AÑO: 1994.
-
- AUTORES: V. Hernández, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Solvent Effects on Electronic Properties, Geometries and Internal Rotation Barriers of Bithiophenes. An *Ab Initio* Self-Consistent Reaction Field Theoretical Study.
 TIPO: Comunicación Póster M-VIII/P8.
 CONGRESO: **European Materials Research Society 1995 Spring Meeting.**
 LUGAR: Strasbourg (FRANCIA). AÑO: 1995.
-
- AUTORES: V. Hernández, J. Casado, F.J. Ramírez, G. Zotti, S. Hotta, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Delocalization Length, Electronic Properties and Vibrational Spectra of Neutral α,α' -Dimethyl End-Capped Oligothiophenes.
 TIPO: Comunicación Póster M-VIII/P8.
 CONGRESO: **European Materials Research Society 1995 Spring Meeting.**
 LUGAR: Strasbourg (FRANCIA). AÑO: 1995.
-
- AUTORES: J. Casado, J.T. López Navarrete, V. Hernández, F.J. Ramírez.
 TÍTULO: Vibrational Study of Amino Acid L-Asparagine in Aqueous Solution.
 TIPO: Comunicación Póster 016
 CONGRESO: **6th European Conference of the Spectroscopy of Biological Molecules.**
 LUGAR: Villeneuve d'Ascq (FRANCIA). AÑO: 1995.

-
- AUTORES: J.T. López Navarrete, V. Hernández, F.J. Ramírez.
 TÍTULO: Solvent Effects on the Structure and Spectra of Glutamine studied by the SCRF Theory.
 TIPO: Comunicación Póster PA11.5.
 CONGRESO: **XXIII European Congress on Molecular Spectroscopy.**
 LUGAR: Lago Balatón (HUNGRÍA). AÑO: 1996.
-
- AUTORES: J.T. López Navarrete, V. Hernández, F.J. Ramírez, J. Casado.
 TÍTULO: Un estudio teórico ab initio de una serie de α, α' -dimetiloligotiofenos en diferentes estados de oxidación: estructuras, barreras de rotación, espectros vibracionales, defectos conjugacionales y efectos de disolvente.
 TIPO: Comunicación Póster V 16.
 CONGRESO: **XV Reunión Nacional de Espectroscopía.**
 LUGAR: Oviedo. AÑO: 1996.
-
- AUTORES: J. Casado, V. Hernández, F.J. Ramírez, Shu Hotta, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Espectro Vibracional de Oligómeros de Polímeros Conductores: Poliaromáticos.
 TIPO: Comunicación Póster V 15.
 CONGRESO: **XV Reunión Nacional de Espectroscopía.**
 LUGAR: Oviedo. AÑO: 1996.
-
- AUTORES: J. Casado, F.J. Ramírez, S. Hotta, J.T. López Navarrete, V. Hernández.
 TÍTULO: Vibrational Spectroscopy Study of Doping Induced Charged Defects in a series of α, α' -Dimethyl End-Capped Oligothiophenes.
 TIPO: Comunicación Póster P1.177.
 CONGRESO: **International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals.**
 LUGAR: Utah (USA). AÑO: 1996.
-
- AUTORES: V. Hernández, A. Berlin, G. Zotti, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Vibrational Analysis as a function of the Chain-Length of Well-Barrier-Well Π -Conjugated Thiophene-Based Oligomers.
 TIPO: Comunicación Póster P2.179.
 CONGRESO: **International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals.**
 LUGAR: Utah (USA). AÑO: 1996.
-
- AUTORES: J. Casado, V. Hernández, F.J. Ramírez, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: A Theoretical Investigation of α, α' -Dimethyl End-Capped Oligothiophenes; Structures, Vibrational Spectra and Conjugation Defects.
 TIPO: Comunicación Póster P3.244.
 CONGRESO: **International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals.**
 LUGAR: Utah (USA). AÑO: 1996.
-
- AUTORES: J. Casado, V. Hernández, F.J. Ramírez, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Ab initio HF and DFT Calculations of Geometric Structures and Vibrational Spectra of Electrically Conducting Doped Oligothiophenes.
 TIPO: Comunicación Póster ES-03-P.
 CONGRESO: **Second European Conference on Computational Chemistry.**
 LUGAR: Lisboa (Portugal). AÑO: 1997.
-
- AUTORES: J. Casado, T.F. Otero, S. Hotta, V. Hernández, F.J. Ramírez, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Electrochemical Doping in a series of α, α' -Dimethyl End-Capped Oligothiophenyls. An FT-Raman Confirmation of a Radical Cation Generation.
 TIPO: Comunicación Póster M-I/P11.
 CONGRESO: **European Materials Research Society 1997 Spring Meeting.**
 LUGAR: Strasbourg (FRANCIA). AÑO: 1997.
-

-
- AUTORES: J.T. López Navarrete, V. Hernández, F.J. Ramírez.
 TÍTULO: Ab Initio Study of Aspartic Acid Conformations in a Cotinuum Solvent Model.
 TIPO: Comunicación Póster 209
 CONGRESO: **7th European Conference on Spectroscopy of Biological Molecules.**
 LUGAR: Madrid (ESPAÑA). AÑO: 1997.
-
- AUTORES: F.J. Ramírez, M.A: Medina, J. Ruiz-Chica, J.T. López Navarrete, F. Sánchez-Jiménez .
 TÍTULO: A Raman Spectroscopic Approach to the Interaction Between Chlorpheniramine and DNA.
 TIPO: Comunicación Póster
 CONGRESO: **7th European Conference on Spectroscopy of Biological Molecules.**
 LUGAR: Madrid (ESPAÑA). AÑO: 1997.
-
- AUTORES: V. Hernández, J. Casado, S. Hotta, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Vibrational and Electronic Spectroscopic Study of Two Oligothiophene Materials Bearing a Heteroquinoid Structure.
 TIPO: Comunicación Póster TUP131.
 CONGRESO: **International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals.**
 LUGAR: Montpellier (FRANCIA). AÑO: 1998.
-
- AUTORES: V. Hernández, J. Casado, Y. Kanemitsu, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Infrared and Raman Spectra of a Well–Barrier–Well 1,2–Di(α,α' –Bithienyl)Vinylene.
 TIPO: Comunicación Póster TUP130.
 CONGRESO: **International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals.**
 LUGAR: Montpellier (FRANCIA). AÑO: 1998.
-
- AUTORES: V. Hernández, J. Casado, L. Favaretto, G. Distefano, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Vibrational Spectra and Ab Initio DFT Calculations of 3,3'–, 3,4'– and 4,4'–Dimethyl–2,2'–Bithiophene.
 TIPO: Comunicación Póster THP63.
 CONGRESO: **International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals.**
 LUGAR: Montpellier (FRANCIA). AÑO: 1998.
-
- AUTORES: J. Casado, S. Hotta, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: FT–IR and FT–Raman Spectra of a series of Oxidized α,α' –Diethyl End–Capped Oligothiényls: a spectroscopic study of Conjugational Model Defects.
 TIPO: Comunicación Oral M/P1.
 CONGRESO: **European Materials Research Society 1998 Spring Meeting.**
 LUGAR: Strasbourg (FRANCIA).
 AÑO: 1998.
 INCIDENCIAS: *Distinguida como la mejor comunicación del congreso.*
-
- AUTORES: V. Hernández, J. Casado, S. Barranco, H. Muguruma, S. Hotta, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Compuestos oligoméricos para láminas delgadas. Estudio de sus propiedades electrónicas por espectroscopía Raman.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **VI Reunión Nacional de Materiales**
 LUGAR: San Sebastián. AÑO: 1999.
-
- AUTORES: V. Hernández, J. Casado, F. Effenberger, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Intramolecular Charge Transfer in Push–Pull Oligothiophenes from their Vibrational Spectra.
 TIPO: Comunicación Póster Mon B113.
 CONGRESO: **International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals.**
 LUGAR: Gastein (AUSTRIA). AÑO: 2000.
-
- AUTORES: J.T. López Navarrete, J. Casado, H. Higuchi, V. Hernández.

- TÍTULO: Theoretical and Vibrational Study of Electron Acceptor Bithienoquinonoids with Well Defined Substitution Patterns.
 TIPO: Comunicación Póster Mon B114.
 CONGRESO: **International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals.**
 LUGAR: Gastein (AUSTRIA). AÑO: 2000.
-
- AUTORES: J. Ramos Barrado, F. Carrique, S. Hotta, J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Impedance Spectroscopy of Pristine and Doped α,α' -Dimethylsexithiophene.
 TIPO: Comunicación Póster Thu A116.
 CONGRESO: **International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals.**
 LUGAR: Gastein (AUSTRIA). AÑO: 2000.
-
- AUTORES: J. Casado, S. Hotta, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Spectroelectrochemical Properties of a New Series of Thiophene-Phenylene Cooligomers.
 TIPO: Comunicación Póster Wed A117.
 CONGRESO: **International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals.**
 LUGAR: Gastein (AUSTRIA). AÑO: 2000.
-
- AUTORES: J. Serrano, J. Casado, V. Hernández, L. Favaretto, G. Distefano, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Vibrational and Theoretical DFT Study of Two Regioregular Methyl-Substituted Bithiophenes.
 TIPO: Comunicación Póster P7.10.
 CONGRESO: **XXV European Congress on Molecular Spectroscopy.**
 LUGAR: Coimbra (PORTUGAL). AÑO: 2000.
-
- AUTORES: J. Casado, H.E. Katz, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Spectroelectrochemical Raman Study of two α,α' -end-capped sexithiophenes as solid films. The effect of the introduction of a polarizable sulfur atom in the side chain.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **MRS Fall Meeting**
 LUGAR: Boston (USA). AÑO: 2000.
-
- AUTORES: V. Hernández, J. Casado, H. Higuchi, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Vibrational and Theoretical Study of π -Conjugated Oligothiienoquinonoids with Potential Applications as Electron-Acceptors and NLO Materials.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **3rd Spanish-Italian Symposium on Organic Chemistry.**
 LUGAR: Benalmádena, Málaga (ESPAÑA). AÑO: 2000.
-
- AUTORES: C. Moreno, J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete,
 TÍTULO: Caracterización espectroelectroquímica Vis-NIR y Raman de oligotiofenos amorfos utilizados en OLEDs.
 TIPO: Comunicación oral corta.
 CONGRESO: **V Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: Peñíscola (Castellón). AÑO: 2001.
-
- AUTORES: E. Ortí, B. Milián, R. Viruela, J.T. López Navarrete, J. Casado, V. Hernández.
 TÍTULO: Quinonoid Oligothiophenes: Evolution of the Structure and Optical Properties with the Oxidation State.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **ESPA 2002, Electronic Structure: Principles and Applications.**
 LUGAR: Sevilla (España). AÑO: 2002.
-
- AUTORES: B. Milián, E. Ortí, R. Viruela, J.T. López Navarrete, J. Casado, V. Hernández.
 TÍTULO: Oligothiophene-based Quinodimethanes as New Optical- and Redox-Active Organic Materials.

- TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **IX International Summer School “Nicolás Cabrera”.
 Frontiers in Science and Technology: “Molecular Electronics”.**
 LUGAR: Miraflores de la Sierra, Madrid (España). AÑO: 2002.
-
- AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J. Casado, J.T. López Navarrete,
 J.M. Raimundo, P. Blanchard, J. Roncali.
 TÍTULO: Infrared and Raman Study, in Solid State and Solution, of Push-Pull
 Chromophores for Second-Order Nonlinear Optics derived from Rigidified Thiophene-
 based π -Conjugated Spacers.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Fifth International Symposium on Functional π -Electron Systems.**
 LUGAR: Ulm/Neu-Ulm, (ALEMANIA). AÑO: 2002.
-
- AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J. Casado, J.T. López Navarrete,
 G. Fuhrmann, A. Kaiser, P. Bäuerle.
 TÍTULO: Infrared and Raman Study of a Series of Macrocyclic π -Conjugated
 Diacetylene-Bridged α -Linked Oligothiophenes in Neutral and Doped States.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Fifth International Symposium on Functional π -Electron Systems.**
 LUGAR: Ulm/Neu-Ulm, (ALEMANIA). AÑO: 2002.
-
- AUTORES: J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, H. Higuchi, E. Ortí,
 B. Milián, R. Pou Américo.
 TÍTULO: Quinoid Oligothiophenes as Electron Donor and Acceptor Active
 Molecular Materials: Spectroelectrochemistry and DFT calculations.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Fifth International Symposium on Functional π -Electron Systems.**
 LUGAR: Ulm/Neu-Ulm, (ALEMANIA). AÑO: 2002.
-
- AUTORES: C. Moreno Castro, M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J. Casado,
 J.T. López Navarrete, Y. Shirota.
 TÍTULO: Vibrational Features of a Novel Family of Amorphous Molecular Materials
 Containing an Oligothiophene Moiety as Colour-Tunable Emitting Materials.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Fifth International Symposium on Functional π -Electron Systems.**
 LUGAR: Ulm/Neu-Ulm, (ALEMANIA). AÑO: 2002.
-
- AUTORES: C. Moreno Castro, M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, S. Hotta,
 V. Hernández, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Raman Spectra of a Novel Family of Thiophene/Phenylene
 co-oligomers in Neutral and Doped States.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XVIIIth International Conference on Raman Spectroscopy.**
 LUGAR: Budapest (Hungría). AÑO: 2002.
-
- AUTORES: J. Casado, M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J.T. López Navarrete,
 B. Milián, P.M. Viruela, E. Ortí.
 TÍTULO: UV-VIS, IR, Raman and Theoretical Characterization of a Novel Type
 of Quinoid Oligothiophenylene Molecular Material.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XXVI European Congress on Molecular Spectroscopy.**
 LUGAR: Lille (Francia). AÑO: 2002.
-
- AUTORES: P.M. Viruela, R. Pou-Américo, E. Ortí, J. Casado, J.T. López Navarrete,
 V. Hernández, B. Milián, P.M. Viruela, E. Ortí.
 TÍTULO: Theoretical Description of the Raman Spectrum of a Vinylene-Bridged
 Quaterthiophene Oligomer.

- TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XXVI European Congress on Molecular Spectroscopy.**
 LUGAR: Lille (Francia). AÑO: 2002.
-
- AUTORES: M. Feliz, R. Llusar, F.R. Sensato, A. Beltrán, J. Andrés,
 J.T. López Navarrete, V. Hernández.
 TÍTULO: Topological analysis of the bond in cuboidal clusters
 with $[Mo_3M'S_4]$ ($M' = Cu$ or Ni) units.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **EURESCO 2002.**
 LUGAR: San Feliú (España). AÑO: 2002.
-
- AUTORES: J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete,
 TÍTULO: Oligotiofenos tetraciano sustituidos: origen molecular y supramolecular de su
 naturaleza eléctrica.
 TIPO: Comunicación oral corta.
 CONGRESO: **VI Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: Cartagena (Murcia). AÑO: 2003.
-
- AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J. Casado, J.T. López Navarrete,
 J.M. Raimundo, P. Blanchard, J. Roncali.
 TÍTULO: Estudio espectroscópico (UV-VIS-NIR, IR y Raman) y computacional
 (DFT y TD-DFT) de cromóforos orgánicos para óptica no-lineal de segundo
 orden con espaciadores π -conjugados centrales bitiofénicos rigidificados.
 TIPO: Comunicación oral corta.
 CONGRESO: **VI Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: Cartagena (Murcia). AÑO: 2003.
-
- AUTORES: S. Delgado Ledesma, M. C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J. T. López Navarrete,
 O.-K. Kim, J.-M. Lehn
 TÍTULO: Espectroscopias UV-Vis-NIR, IR y Raman y cálculos químico-cuánticos DFT y
 TDDFT sobre cromóforos orgánicos para óptica no lineal de segundo orden,
 conteniendo un ditienotiofeno π -conjugado central.
 TIPO: Comunicación oral corta.
 CONGRESO: **VI Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: Cartagena (Murcia). AÑO: 2003.
-
- AUTORES: J.T. López Navarrete, J. Casado, M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández,
 J.M. Raimundo, P. Blanchard, J. Roncali.
 TÍTULO: Caracterización por espectroscopia infrarroja y Raman y métodos químico-cuánticos de
 oligotiofenos sustituidos con grupos dadores y aceptores de electrones con aplicaciones
 en óptica no-lineal de segundo orden.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XXIX Reunión Bienal Conmemorativa del Centenario de la
 Real Sociedad Española de Química**
 LUGAR: Madrid. AÑO: 2003.
-
- AUTORES: V. Hernández, J. Casado, Y. Shirota, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Oligotiofenos como materiales electroluminiscentes: computación y
 espectroelectroquímica como herramientas complementarias para el estudio
 de su estructura electrónica.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XXIX Reunión Bienal Conmemorativa del Centenario de la
 Real Sociedad Española de Química**
 LUGAR: Madrid. AÑO: 2003.
-
- AUTORES: J. Casado, H. Higuchi, E. Ortí, B. Milián, V. Hernández, J.T. López Navarrete.

TÍTULO: Oligotiofenos quinoides con comportamiento rédox anfótero: electroquímica, espectroelectroquímica y cálculos computacionales.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XXIX Reunión Bienal Conmemorativa del Centenario de la Real Sociedad Española de Química**
 LUGAR: Madrid. AÑO: 2003.

AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J. Casado, J.T. López Navarrete, J.M. Raimundo, P. Blanchard, J. Roncali.
 TÍTULO: Caracterización químico-cuántica (DFT y TD-DFT) y espectroscópica de cromóforos dador-aceptor para óptica no-lineal de segundo orden: moléculas con espaciadores π -conjugados oligotiofénicos rigidificados.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **29^{eme} Congrès International des Chemistes Theoriciens d'Expression Latine**
 LUGAR: Marrakech (Marruecos). AÑO: 2003.

AUTORES: J. Casado, M. C. Ruiz Delgado, R. Ponce Ortiz, V. Hernández, J. T. López Navarrete, R. G. Hicks, D. J. T. Myles.
 TÍTULO: Spectroscopic and theoretical DFT study of single and double oxidized mesithyl thio-oligothiophenes as model for electrode-single molecule-electrode devices.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Sixth International Symposium on Functional π -Electron Systems F π 6**
 LUGAR: Ithaca (USA). AÑO: 2004.

AUTORES: R. Ponce Ortiz, M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, V. Hernández, O-K. Kim, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: *In situ* spectroelectrochemical and DFT studies of some D- π -D chromophores bearing dithienothiophene (DTT) as π -center, and showing unusual amphoteric redox properties.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Sixth International Symposium on Functional π -Electron Systems F π 6**
 LUGAR: Ithaca (USA). AÑO: 2004.

AUTORES: S. Delgado Ledesma, R. Ponce Ortiz, M.C. Ruiz Delgado, Y. Vida, E. Pérez-Inestrosa, J. Casado, V. Hernández, O-K. Kim, J.-M. Lehn, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: Vibrational and Quantum-Chemical Study of Nonlinear Optical Chromophores containing Dithienothiophene as the Electron Relay.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Sixth International Symposium on Functional π -Electron Systems F π 6**
 LUGAR: Ithaca (USA). AÑO: 2004.

AUTORES: V. Cuberos Guzmán, R. Ponce Ortiz, M. C. Ruiz Delgado, R. Azumi, R.T Oakley, J. Casado, V. Hernández and J. T. López Navarrete.
 TÍTULO: Combined Spectroscopic, Electrochemical and quantum-chemical study of a series of oligothiophenes end-capped by nitriles in various redox states.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Sixth International Symposium on Functional π -Electron Systems F π 6**
 LUGAR: Ithaca (USA). AÑO: 2004.

AUTORES: R. Malavé Osuna, R. Ponce Ortiz, M. C. Ruiz Delgado, E. Perez-Inestrosa, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete.
 TÍTULO: Synthesis, Spectroscopic, Cyclic Voltammetric and Quantum Chemical DFT Study of a Narrow-Bandgap Π -Conjugated Compound Containing Bithiophene Electron-Donor Units Linked to a Central Electron-Acceptor Di-Cyano-Substituted Pyrazine Moiety.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Sixth International Symposium on Functional π -Electron Systems F π 6**
 LUGAR: Ithaca (USA). AÑO: 2004.

AUTORES: M. C. Ruiz Delgado, R. Ponce Ortiz, V. Hernández, J. T. López Navarrete, S. Tanaka,

- Y. Yamashita.
 TÍTULO: Vibrational Spectroscopy and DFT Theoretical Study of Narrow-Bandgap Heterocyclic Cooligomers Containing Alternating Aromatic-Donor and *o*-Quinoid-Acceptor Units.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Sixth International Symposium on Functional π -Electron Systems F π 6**
 LUGAR: Ithaca (USA). AÑO: 2004.
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, P. Blanchard, J. Roncali, V. Hernandez, J.T. Lopez Navarrete.
 TÍTULO: Synthesis , Spectroscopic, Cyclic Voltammetric, *in situ* Spectroelectrochemical and DFT Theoretical Study of Narrow-Bandgap Π -Conjugated Mixed Heterocyclic Trimers Containing EDOT Electron-Donor Units Linked to a Central Electron-Acceptor Thienopyrazine Moiety.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Sixth International Symposium on Functional π -Electron Systems F π 6**
 LUGAR: Ithaca (USA). AÑO: 2004.
-
- AUTORES: M. C. Ruiz Delgado, R. Ponce Ortiz, J. Casado, P. Blanchard, J. Roncali, V. Hernández, J. T. López Navarrete.
 TÍTULO: Synthesis, cyclic voltammetry, UV-VIS-NIR and FT-Raman spectroscopies and DFT theoretical study of narrow-bandgap π -conjugated mixed heterocyclic trimers containing EDOT donor and thienopyrazine acceptor units.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Internacional Conference on Synthetic Metals ICSM2004**
 LUGAR: Wollongong (Australia). AÑO: 2004.
-
- AUTORES: M. C. Ruiz Delgado, R. Ponce Ortiz, Y. Yamashita, V. Hernández, J. T. López Navarrete.
 TÍTULO: Combined spectroscopic, electrochemical and theoretical study of a biphenylene-TCNQ and a phenylene-TFF analogues containing fused 1,2,5-thiadiazole units.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Internacional Conference on Synthetic Metals ICSM2004**
 LUGAR: Wollongong (Australia). AÑO: 2004.
-
- AUTORES: J. Casado, R. Ponce Ortiz, M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, A.Facchetti, T.J. Marks.
 TÍTULO: Vibrational, Spectroelectrochemical and DFT Studies on a family of fluorocarbon-substituted oligothiophenes showing *n*-type conduction in Thin Film Transistors.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Internacional Conference on Synthetic Metals ICSM2004**
 LUGAR: Wollongong (Australia). AÑO: 2004.
-
- AUTORES: V. Cuberos Guzmán, M. C. Ruiz Delgado, R. Ponce Ortiz, V. Hernández, J. Casado, J.T. López Navarrete, R. Azumi, R. T. Oakley.
 TÍTULO: Spectroscopic, Electrochemical and Theoretical Study of oligothiophenes end-capped by nitriles in various redox states.
 TIPO : Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Internacional Conference on Synthetic Metals ICSM2004**
 LUGAR: Wollongong (Australia). AÑO: 2004.
-
- AUTORES: J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, S. Ito, N. Morita.
 TÍTULO: Raman and DFT study of a series of poly(6-azulenylethynyl)benzene derivatives with multielectron redox and electrochromic behavior.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Internacional Conference on Synthetic Metals ICSM2004**
 LUGAR: Wollongong (Australia). AÑO: 2004.
-
- AUTORES: J. Casado, R. Réau, V. Hernández, J.T. López Navarrete.

- TÍTULO: Combined Raman, electrochemical and DFT/TD-DFT studies on a series of α , α' -thiophene-phosphole oligomers and their corresponding polymers
TIPO: Comunicación Póster.
CONGRESO: **Internacional Conference on Synthetic Metals ICSM2004**
LUGAR: Wollongong (Australia). AÑO: 2004.
-
- AUTORES: J.Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete C. Parejo, F. Fernández-Lázaro, Á. Sastre-Santos, F. Wudl.
TÍTULO: Synthesis, Spectroscopic and Quantum Chemical DFT studies of new pleiadene-based materials.
TIPO: Comunicación Póster.
CONGRESO: **Internacional Conference on Synthetic Metals ICSM2004**
LUGAR: Wollongong (Australia). AÑO: 2004.
-
- AUTORES: M.C. Rey Merchán, M. C. Ruiz Delgado, J. Casado, P. Blanchard, J. Roncali, V. Hernández, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: DFT and UV-Vis-NIR, FT-IR and FT-Raman spectroscopic study of push-pull NLO-phores containing EDOT or 3,4-dihexyloxi-thiophene as the electron relay.
TIPO: Comunicación Póster.
CONGRESO: **Internacional Conference on Synthetic Metals ICSM2004**
LUGAR: Wollongong (Australia). AÑO: 2004.
-
- AUTORES: R. Malavé Osuna, M. C. Ruiz Delgado, J. Casado, S. A. Jeneckhe, A. J. Bard, V. Hernández, J. T. López Navarrete
TÍTULO: Spectroelectrochemical and Quantum Chemical DFT Study of a 3,7-[bis[4-phenyl-2-quinolyl]]-10-methylphenothiazine donor-acceptor molecule.
TIPO: Comunicación Póster.
CONGRESO: **Internacional Conference on Synthetic Metals ICSM2004**
LUGAR: Wollongong (Australia). AÑO: 2004.
-
- AUTORES: S. Delgado Ledesma, M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J. Casado, R. Ponce Ortiz, J. T. López Navarrete, O.-K. Kim, J.-M. Lehn.
TÍTULO: Estudio espectroscópico y computacional de cromóforos orgánicos para óptica no-lineal de segundo orden, conteniendo un espaciador Π -conjugado ditienotiofénico (DTT) central.
TIPO: Comunicación Póster.
CONGRESO: **XIX Reunión Nacional de Espectroscopía**
LUGAR: Canarias. AÑO: 2004.
-
- AUTORES: S. Delgado Ledesma, R. Ponce Ortiz, M.C. Ruiz Delgado, Y. Vida, E. Pérez-Inestrosa, J. Casado, V. Hernández, O-K. Kim, J.-M. Lehn, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: Vibrational and Quantum-Chemical Study of push-pull Chromophores bearing Dithienothiophene as the Electron Relay.
TIPO: Comunicación Póster.
CONGRESO: **The 5th International Wilhelm and Else Heraeus Summerschool**
LUGAR: Wittenberg (Alemania). AÑO: 2004.
-
- AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, R. Ponce Ortiz, J. T. López Navarrete, S. Tanaka, Y. Yamashita.
TÍTULO: Vibrational and Quantum Chemical Study of Narrow-Bandgap Heterocyclic Cooligomers Containing Alternating Aromatic-Donor and *o*-Quinoid-Acceptor Units
TIPO: Comunicación Póster.
CONGRESO: **The 5th International Wilhelm and Else Heraeus Summerschool**
LUGAR: Wittenberg (Alemania). AÑO: 2004.
-
- AUTORES: R. Malavé Osuna, R. Ponce Ortiz, M. C. Ruiz Delgado, R. Rathore, V. Hernández, J. T. López Navarrete.

- TÍTULO: FT-IR and FT-Raman Spectroscopic Study aided by DFT Calculations of some π -stacked polyfluorenes.
TIPO: Comunicación Póster.
CONGRESO: **EUCMOS 2004**
LUGAR: Cracovia (Polonia) AÑO: 2004.
-
- AUTORES: V. Cuberos Guzmán, R. Ponce Ortiz, M. C. Ruiz Delgado, R. Azumi, R. T. Oakley, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete.
TÍTULO: FT- IR and FT-Raman Spectroscopic Study, aided by Quantum Chemical DFT Calculations, of a series of oligothiophenes end-capped by nitriles.
TIPO: Comunicación Póster.
CONGRESO: **EUCMOS 2004**
LUGAR: Cracovia (Polonia) AÑO: 2004.
-
- AUTORES: J. Casado, G. Zotti, R. Ponce Ortiz, J. T. López Navarrete.
TÍTULO: Combined UV-Vis-NIR and Raman study of 3,4-ethylenedioxy and S,S-dioxide substituted terthiophenes and their parent polymers.
TIPO: Comunicación Póster.
CONGRESO: **EUCMOS 2004**
LUGAR: Cracovia (Polonia) AÑO: 2004.
-
- AUTORES: M. C. Ruiz Delgado, F. J. Ramírez, V. Hernández, F. Enríquez, J. T. López Navarrete.
TÍTULO: Vibrational dynamics study of the effect of the substituents on π -conjugation of different bithiophene molecules
TIPO: Comunicación Póster.
CONGRESO: **EUCMOS 2004**
LUGAR: Cracovia (Polonia) AÑO: 2004.
-
- AUTORES: L. Salford, F. Lubelli, M. Kozaki, V. Hernández, M.C. Ruiz Delgado, R. Ponce Ortiz, J. Casado, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: Dímeros de ciclopentadieno con bajo "gap" electrónico. Estudio electroquímico, Raman y teórico.
TIPO: Comunicación oral corta.
CONGRESO: **VII Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
LUGAR: Boí-Taull (Lérida). AÑO: 2005.
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete, G. Zotti, S. Zecchin, B. Vercelli.
TÍTULO: Propiedades magnéticas y conductoras de oligotiofenos quinoides tetaciano sustituidos.
TIPO: Comunicación oral corta.
CONGRESO: **VII Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
LUGAR: Boí-Taull (Lérida). AÑO: 2005.
-
- AUTORES: F. Lubelli, L. Salford, P. Bäuerle, P. Frère, V. Hernández, M.C. Ruiz Delgado, R. Ponce Ortiz, J. Casado, J.T. López Navarrete.
TÍTULO: Oligotiofenos sustituidos con grupos EDO. Estudio electroquímico, espectroscópico y teórico.
TIPO: Comunicación oral corta.
CONGRESO: **VII Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
LUGAR: Boí-Taull (Lérida). AÑO: 2005.
-
- AUTORES: M. C. Ruiz Delgado, L. Carrasquer, R. Andreu, J. Orduna, J. Garín, J. Casado, J. T. López Navarrete.
TÍTULO: Análisis Estructural mediante espectroscopía IR y Raman y Estudio de las Propiedades Ópticas de una serie de NLO-foros Proaromáticos.
TIPO: Comunicación oral corta.
CONGRESO: **VII Escuela Nacional de Materiales Moleculares**

- LUGAR: Boí-Taull (Lérida). AÑO: 2005.
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete, G. Zotti, S. Zecchin, B. Vercelli.
 TÍTULO: Electrochemical, Magnetic and Conductive Properties of Quinoid (Dicyanomethylene)-Oligothiophenes.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **1st ECHEMS Meeting: Electrochemistry and Nanoscience**
 LUGAR: Venecia (Italia) AÑO: 2005.
-
- AUTORES: R. Malavé Osuna, M. C. Ruiz Delgado, R. Ponce Ortiz, V. Hernández, J. Casado, J. T. López Navarrete, A. Berlin, G. Zotti.
 TÍTULO: Synthesis and Characterization of a Novel Quinoid Oligothiophene as Electron-Donor and Electron-Acceptor Material. A Spectroscopic, Electrochemical and Theoretical Study.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Trends in Nanoscience: Structure and Functions**
 LUGAR: Kloster Irsee (Alemania) AÑO: 2005.
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, R. Malavé Osuna, M. C. Ruiz Delgado, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete, Y. Sakamoto, T. Suzuki.
 TÍTULO: Perfluorination of Tetracene: Effects on the Optical Gap and Electron-Acceptor Properties. An electrochemical, Theoretical DFT and Raman Spectroscopic Study.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Photonics Europe (An SPIE Europe Event).**
 LUGAR: Strasbourg (Francia). AÑO: 2006.
-
- AUTORES: R. Malavé Osuna, R. Ponce Ortiz, M. C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J. T. López Navarrete, X. Zhang, A. J. Matzger.
 TÍTULO: Combined Quantum Chemical DFT and Spectroscopic Raman and UV-Vis-NIR Study of Fused α -Oligothiophenes with Five and Seven Rings.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **Photonics Europe (An SPIE Europe Event).**
 LUGAR: Strasbourg (Francia). AÑO: 2006.
-
- AUTORES: R. Malavé Osuna, R. Ponce Ortiz, M. C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J. T. López Navarrete, X. Zhang, A. J. Matzger.
 TÍTULO: Raman Spectroscopic Analysis and DFT Calculations on Two Fused Thienoacenes with Five and Seven Rings.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **The International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals (ICSM 2006).**
 LUGAR: Dublín (Irlanda). AÑO: 2006.
-
- AUTORES: M. C. Ruiz Delgado, R. Ponce Ortiz, R. Malavé Osuna, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete, Y. Sakamoto, T. Suzuki.
 TÍTULO: Perfluorinated Tetracene: Synthesis, Electrochemistry, Raman Spectroscopy Analysis and DFT Theoretical Calculations.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **The Int. Conf. on Science and Technology of Synthetic Metals (ICSM 2006).**
 LUGAR: Dublín (Irlanda). AÑO: 2006.
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, M. Moreno Oliva, V. Hernández, J. Casado, J. T. López Navarrete, E. Ortí, P. M. Viruela, K. Takimiya, T. Otsubo.
 TÍTULO: Extensive Quinoidal Oligothiophenes: Raman and Theoretical Evidences of Low-Energy Triplet States.
 TIPO: Comunicación Póster.

- CONGRESO: **The International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals (ICSM 2006).**
 LUGAR: Dublín (Irlanda). AÑO: 2006.
-
- AUTORES: J. Casado, M. Moreno Oliva, J. T. López Navarrete, T. M. Pappenfus, P. C. Ewbank, M. W. Burand, D. E. Janzen, K. R. Mann.
 TÍTULO: Molecular and Electronic Structures of Aromatic and Quinoidal S,S,-Dioxide Terthiophenes. Complementary Systems for Organic Electronic Materials.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **The International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals (ICSM 2006).**
 LUGAR: Dublín (Irlanda). AÑO: 2006.
-
- AUTORES: M. Moreno Oliva, G. Hennrich, J. Casado, J. T. López Navarrete.
 TÍTULO: Vibrational Spectra of a Non Linear Optical Chromophores Based on C3-Symmetric 1,3,5-Trisalkynylbenzenes.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XXVIII European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS 2006).**
 LUGAR: Estambul (Turquía). AÑO: 2006.
-
- AUTORES: M. Moreno Oliva, J. Casado, V. Troaini, P. de la Cruz, F. Langa, J. T. López Navarrete.
 TÍTULO: Vibrational Spectra of Oligothieryl-Vinylenes with Donor- π -Donor and Donor- π -Acceptor Substitution Patterns.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XXVIII European Congress on Molecular Spectroscopy (EUCMOS 2006).**
 LUGAR: Estambul (Turquía). AÑO: 2006.
-
- AUTORES: R. Malavé Osuna, R. Ponce Ortiz, M. C. Ruiz Delgado, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete, Y. Sakamoto, T. Suzuki.
 TÍTULO: Electrochemical, Theoretical and Raman Spectroscopic Study of Perfluorinated Tetracene.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XX Reunión Nacional de Espectroscopía. IV Congreso Ibérico de Espectroscopía.**
 LUGAR: Ciudad Real (España). AÑO: 2006.
-
- AUTORES: M. Moreno Oliva, G. Hennrich, J. Casado, J.T. López Navarrete.
 TÍTULO: C3-Symmetric 1,3,5-Trisalkynylbenzenes as Active NLO Molecules: Analysis of its Vibrational and Molecular Properties.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XX Reunión Nacional de Espectroscopía**
 LUGAR: Ciudad Real (España). AÑO: 2006.
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, J. Casado, M. Moreno Oliva, J. T. López Navarrete, W. Porter, T. Vaid, L. Hermosilla, C. Sieiro.
 TÍTULO: On the Enigmatic Electronic Structure of Extended Viologens. Contributions of Raman Spectroscopy, ESR and Theory.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **The Sixth European Federation of EPR Groups Meeting (EFEP-06).**
 LUGAR: Madrid (España). AÑO: 2006.
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, V. Hernández, J. Casado, M. Moreno Oliva, J. T. López Navarrete, E. Ortí, P. M. Viruela, K. Takimiya, T. Otsubo, L. Hermosilla, C. Sieiro.
 TÍTULO: Extensive Quinoidal Oligothiophenes: Raman, Theoretical and ESR Evidences of Low-Energy Triplet States.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **The Sixth European Federation of EPR Groups Meeting (EFEP-06).**
 LUGAR: Madrid (España). AÑO: 2006.
-

- AUTORES: R. Ponce Ortiz, R. Malavé Osuna, V. Hernández, J. T. López Navarrete, X. Zhang, A. J. Matzger, L. Hermosilla, C. Sieiro.
- TÍTULO: DFT, Spectroscopic and ESR Study of Pentathienoacene in Neutral and Doped States.
- TIPO: Comunicación Póster.
- CONGRESO: **The Sixth European Federation of EPR Groups Meeting (EFEP-06).**
- LUGAR: Madrid (España). AÑO: 2006.
-
- AUTORES: J. Casado, R. Ponce Ortiz, M. Moreno Oliva, J. T. López Navarrete, W. Porter, T. Vaid
- TÍTULO: On the Enigmatic Electronic Structure of Extended Viologens. Contributions of Raman Spectroscopy and Theory.
- TIPO: Comunicación Póster.
- CONGRESO: **The Seventh International Symposium on Functional π -Electron Systems (F π 7)**
- LUGAR: Osaka (Japón). AÑO: 2006.
-
- AUTORES: J. Casado, R. Ponce Ortiz, M. Moreno Oliva, V. Hernández, J. T. López Navarrete, E. Ortí, P. M. Viruela, K. Takimiya, T. Otsubo.
- TÍTULO: Electronic and Molecular Properties of Extensive Quinoidal Oligothiophenes. A Raman Spectroscopic and Theoretical Analysis.
- TIPO: Comunicación Póster.
- CONGRESO: **The Seventh International Symposium on Functional π -Electron Systems (F π 7)**
- LUGAR: Osaka (Japón). AÑO: 2006.
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete, J. A. Letizia, A. Facchetti, T. J. Marks.
- TÍTULO: Sistemas mixtos oligotiofenos-azinas como semiconductores para OFETs.
- TIPO: Comunicación oral corta.
- CONGRESO: **VIII Escuela Nacional de Materiales Moleculares.**
- LUGAR: Estepona (España). AÑO: 2007.
-
- AUTORES: R. Malavé Osuna, V. Hernández, J. T. López Navarrete, E. D'Oría, J. J. Novoa.
- TÍTULO: Empaquetamiento Cristalino de Perfluoroacenos: Estudio Estadístico y Teórico.
- TIPO: Comunicación oral corta.
- CONGRESO: **VIII Escuela Nacional de Materiales Moleculares.**
- LUGAR: Estepona (España). AÑO: 2007.
-
- AUTORES: M. Moreno Oliva, G. Hennrich, J. Casado, J. T. López Navarrete.
- TÍTULO: NLO-foros Octopolares. Síntesis y Estudios Espectroscópico y Teórico.
- TIPO: Comunicación oral corta.
- CONGRESO: **VIII Escuela Nacional de Materiales Moleculares.**
- LUGAR: Estepona (España). AÑO: 2007.
-
- AUTORES: S. Rodríguez González, M. C. Ruiz Delgado, S. R. Marder, S. Barlow, J. T. López Navarrete, J. Casado.
- TÍTULO: Estudio de la estructura electrónica y molecular de OligoFenilenos-Vinilenos funcionalizados con grupos dadores y aceptores de electrones.
- TIPO: Comunicación oral corta.
- CONGRESO: **VIII Escuela Nacional de Materiales Moleculares.**
- LUGAR: Estepona (España). AÑO: 2007.
-
- AUTORES: J. M. Montenegro, E. Pérez-Inestrosa, R. Suau, M. Manuela Raposo, J. T. López Navarrete, V. Hernández, R. Ponce Ortiz
- TÍTULO: Synthesis, Spectroscopic and Electrochemical Study of Acceptor-Wire-Donor Systems with Modulable Acceptor Ability.
- TIPO: Comunicación Póster.
- CONGRESO: **II Jornadas Ibéricas de Fotoquímica.**
- LUGAR: Faro (Portugal). AÑO: 2007.
-
- AUTORES: M. Moreno Oliva, M. C. Ruiz Delgado, R. Ponce Ortiz, J. Casado, V. Hernández,

- J. T. López Navarrete.
 TÍTULO: Análisis Espectroscópico UV-VIS-NIR y Químico Cuántico DFT de una Serie de Oligotiofenos Push-Pull Funcionalizados con Grupos Amino/Cianovinileno.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XXXI Reunión Bienal de la RSEQ.**
 LUGAR: Toledo (España). AÑO: 2007.
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete, P. M. Viruela, E. Ortí, K. Takimiya, T. Otsubo.
 TÍTULO: Evidencias experimentales y teóricas de la naturaleza birradicalaria de oligotiofenos quinoides de cadena larga.
 TIPO: Comunicación oral corta y poster.
 CONGRESO: **5ª Escuela de Resonancia Paramagnética Electrónica**
 LUGAR: Valencia (España). AÑO: 2007.
-
- AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete, O.-K. Kim, H.Y. Woo, J. Orduna, B. Villacampa, R. Alicante.
 TÍTULO: NLO properties of Dithieno-based chromophores: A comparison study between the Donor/Donor and Dono/Acceptor substitution patterns.
 TIPO: Comunicación oral corta.
 CONGRESO: **SPIE Optics and Photonics**
 LUGAR: San Diego (USA) AÑO: 2007.
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete, P. M. Viruela, E. Ortí, K. Takimiya, T. Otsubo.
 TÍTULO: Oligotiofenos quinoides de cadena larga: ¿Nuevos materiales para espintrónica?
 TIPO: Comunicación oral.
 CONGRESO: **IV Simposium de Investigadores Jóvenes de la RSEQ.**
 LUGAR: Burgos (España). AÑO: 2007.
-
- AUTORES: M.C. Ruiz Delgado, R. Malavé Osuna, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete, Y. Youichi Sakamoto, S. Komatsu, T. Suzuki, M. Kobayashi, Y. Gao, Y. Fukai, D. A. da Silva, J.L. Brédas.
 TÍTULO: Structure-property Relationships in Perfluorinated Acenes: a Joint Experimental and Theoretical Study.
 TIPO: Comunicación poster.
 CONGRESO: **Fifth Annual CMDITR Retreat**
 LUGAR: Atlanta (USA). AÑO: 2008.
-
- AUTORES: S. Rodríguez González, M. C. Ruiz Delgado, J. T. López Navarrete, J. Casado, S. R. Marder, S. Barlow.
 TÍTULO: Propiedades Ópticas de Oligofenilenos-Vinilenos.
 TIPO: Comunicación oral corta.
 CONGRESO: **IX Escuela Nacional de Materiales Moleculares.**
 LUGAR: Peñíscola (España). AÑO: 2008.
-
- AUTORES: M. Moreno Oliva, L. De Cola, G. Hennrich, J. T. López Navarrete, J. Casado.
 TÍTULO: Fotoluminiscencia y Óptica No Lineal de moléculas octupolares basadas en tiofenos.
 TIPO: Comunicación oral corta.
 CONGRESO: **IX Escuela Nacional de Materiales Moleculares.**
 LUGAR: Peñíscola (España). AÑO: 2008.
-
- AUTORES: S. Rodríguez González, J. T. López Navarrete, J. Casado, J. L. Segura, R. Blanco.
 TÍTULO: A β -Naphthalene-Imide Modified Terthiophene Exhibiting Charge Transfer and Polarization Through the Short Molecular Axis. Joint Spectroscopic and Theoretical Study.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **IV International Krutyn Summer School 2008.**

- LUGAR: Krutyn (Polonia). AÑO: 2008.
-
- AUTORES: M. Moreno Oliva, T. M. Pappenfus, J. Casado, J. T. López Navarrete.
 TÍTULO: Photophysical Properties of Thiophene-Pyrrole Co-Oligomers.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **IV International Krutyn Summer School 2008.**
 LUGAR: Krutyn (Polonia). AÑO: 2008.
-
- AUTORES: J. Aragón, P. Viruela, E. Ortí, R. Malavé Osuna, V. Hernández, J. T. López Navarrete.
 TÍTULO: Linearly Condensed Oligothiophenes: A Joint Theoretical-Experimental Approach
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **F π 8 The 8th International Symposium of Functional π -electron systems**
 LUGAR: Graz (Austria). AÑO: 2008.
-
- AUTORES: E. Ortí, P. Viruela, R. Ponce Ortiz, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete.
 TÍTULO: Quinoidal Oligothiophenes with a Large Biradical Character
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **F π 8 The 8th International Symposium of Functional π -electron systems**
 LUGAR: Graz (Austria). AÑO: 2008.
-
- AUTORES: R. Malavé Osuna, V. Hernández, J. T. López Navarrete, B. Vercelli,
 G. Zotti, P. Bäuerle.
 TÍTULO: In situ UV-Vis-NIR Spectroelectrochemical Study of a Series of
 Dicyanovinyl End-Capped Oligothiophenes
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **59th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry.**
 LUGAR: Sevilla (España). AÑO: 2008.
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, J. Casado, J. T. López Navarrete, Y. Wang, A. Facchetti, T. J. Marks, E.
 Del Corro, M. Taravillo, V. García Baonza.
 TÍTULO: The Effect of Pressure on Twisted π -Electron System Electro-Optic Chromophores.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **46th EHPRG International Conference.**
 LUGAR: Valencia (España). AÑO: 2008.
-
- AUTORES: J. Casado, R. Ponce Ortiz, J. T. López Navarrete
 TÍTULO: Triplet Excited States. Three Exciting Raman Cases
 TIPO: Comunicación en poster.
 CONGRESO: **Gordon Research Conferences on Electronic Processes of Organic Materials**
 LUGAR: Boston (EEUU). AÑO: 2008.
-
- AUTORES: M. C. Ruiz Delgado, R. Malavé Osuna, J. Casado, V. Hernández, J. T. López Navarrete,
 Y. Sakamoto, S. Komatsu, T. Suzuki, M. Kobayashi, Y. Gao, Y. Fukai,
 D. A. da Silva Filho, J.-L. Brédas.
 TÍTULO: Charge Transport Properties in Perfluoroacene Crystals.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **The Second Solvey-Cope Symposium**
 LUGAR: Atlanta, GA (USA).
 FECHA: 2008
-
- AUTORES: A. Dadvand, F. Cicoira, K. Yu. Chernichenko, E. S. Balenkova,
 R. Malavé Osuna, F. Rosei, V. G. Nenajdenko, D. F. Perepichka.
 TÍTULO: Heterocirculenes as a new class of organic semiconductors
 TIPO: Comunicación Póster
 CONGRESO: **Trends in Nanotechnology (TNT2008).**
 LUGAR: Oviedo (España)
 FECHA: 2008
-

AUTORES: G. Zotti, B. Vercelli, R. Malavé Osuna, V. Hernández, J. T. López Navarrete.
 TÍTULO: Oligotiofenos Fusionados: Estudio Electroquímico, Espectroelectroquímico y EPR.
 TIPO: Comunicación Oral
 CONGRESO: **Simposio de Investigadores Jóvenes de la Real Sociedad Española de Química (V SIJ - RSEQ).**
 LUGAR: Santiago de Compostela (España)
 FECHA: 2008

AUTORES: R. Malavé Osuna, B. Vercelli, G. Zotti, C. Capel Ferrón, M. C. Ruiz Delgado, Juan Novoa, V. Hernández, J. T. López Navarrete.
 TÍTULO: π -Dimerización en Oligotienoacenos: Estudio Experimental y Teórico.
 TIPO: Comunicación Oral
 CONGRESO: **XXX Reunión del Grupo de Electroquímica de la RSEQ. XI Encontro Ibérico de Electroquímica.**
 LUGAR: Tenerife (España)
 FECHA: 2009

AUTORES: C. Capel, R. Malavé, Osuna, B. Vercelli, G. Zotti, V. Hernández, J. T. López Navarrete
 TÍTULO: Estudio electroquímico, espectroelectroquímico y ESR de oligotiofenos fusionados
 TIPO: Comunicación Oral
 CONGRESO: **X Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: Elche, Alicante (España)
 FECHA: 8-13 Febrero, 2009

AUTORES: C. Capel, R. Malavé, Osuna, B. Vercelli, G. Zotti, V. Hernández, J. T. López Navarrete
 TÍTULO: Estudio electroquímico y espectroelectroquímico de una serie de oligotiofenos fusionados.
 TIPO: Comunicación Oral
 CONGRESO: **XXX Reunion del Grupo de Electroquímica de la RSEQ. XI Encontro Ibérico de Electroquímica**
 LUGAR: Tenerife (España)
 FECHA: 19-22 Julio, 2009

AUTORES: M. Moreno Oliva, S. Rodríguez González, J. Casado, J.T. López Navarrete, J.S. Seixas de Melo, S. Rozen.
 TÍTULO: Optical Properties of [all]-S,S-Dioxide Oligothiophenes.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **7th Workshop on Luminescent Conjugated Polymers.**
 LUGAR: Faro (Portugal).
 FECHA: 27-28 Marzo 2009

AUTORES: J. Casado, F.J. Ramírez, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: Espectroscopía Raman y detección de estados excitados tripletes de alto espín
 TIPO: Comunicación Oral.
 CONGRESO: **XXXII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química**
 LUGAR: Oviedo
 FECHA: 13-18 Septiembre 2009

AUTORES: J.M. Montenegro, J.Casado, J.T. López Navarrete, R.Suau, E. Pérez-Inestrosa
 TÍTULO: Una nueva generación de cromóforos ditópicos VSD (Voltaje-Sensitive-Dyes) para aplicaciones biomédicas
 TIPO: Comunicación Oral.
 CONGRESO: **IX Congreso de Fotoquímica**
 LUGAR: Leioa (Vizcaya)
 FECHA: 2009

AUTORES: C. Capel, J. Casado, J.T. López Navarrete, A. Dreger, A. Schmidt, F.J. Ramírez,
 TÍTULO: Aplicación de la espectroscopía Raman al estudio de la pseudo-cross-conjugation en betainas mesoméricas
 TIPO: Comunicación Oral.
 CONGRESO: **XXXII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química**
 LUGAR: Oviedo
 FECHA: 13-18 Septiembre 2009

AUTORES: C. Capel, B. Vercelli, G. Zotti, M. He, W. Niu, V. Hernández, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: Electrochemical and Spectroelectrochemical study of Alkyl-substituted Heptatienoacenes
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XII Iberic Meeting of Electrochemistry and XVI Meeting of the Portuguese Electrochemical Society**
 LUGAR: Lisboa (Portugal)
 FECHA: 2010

AUTORES: C. Capel, B. Vercelli, G. Zotti, J.M. Montenegro, E. Pérez-Inestrosa, V. Hernández, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: Electrochemistry of Push-Pull Compounds Based on Quinoline-N-Oxides
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XII Iberic Meeting of Electrochemistry and XVI Meeting of the Portuguese Electrochemical Society**
 LUGAR: Lisboa (Portugal)
 FECHA: 2010

AUTORES: D. Collado, J. Casado, R. Suau, E. Pérez-Inestrosa, I. Morato, S. Rodríguez González, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: Electrochemistry of Push-Pull Compounds Based on Quinoline-N-Oxides
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XIII IUPAC Symposium on Photochemistry**
 LUGAR: Ferrara (Italia)
 FECHA: 2010

AUTORES: B. Nieto Ortega, F.J. Ramírez, G. Hennrich, B. Gómez-Lor, J. Casado, J. T. López Navarrete
 TÍTULO: Espectros VCD de agregados moleculares de moléculas octopolares
 TIPO: Comunicación Oral
 CONGRESO: **XI Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: Peñafiel (Valladolid)
 FECHA: 2010

AUTORES: C. Capel, B. Vercelli, G. Zotti, E. Pérez-Inestrosa, V. Hernández, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: Estudio electroquímico de compuestos push-pull basado en oligotiofenos nlo-foros de Quinolina
 TIPO: Comunicación Oral
 CONGRESO: **XI Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: Peñafiel (Valladolid)
 FECHA: 2010

AUTORES: C. Capel, B. Vercelli, G. Zotti, M. He, W. Niu, V. Hernández, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: Electrochemical and Spectroelectrochemical study of Alkyl-substituted Heptatienoacenes
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **International Workshop on Molecular Materials**
 LUGAR: Sanxenxo (Pontevedra)
 AÑO: 2010

AUTORES: M. Moreno Oliva, J. Casado, J.T. López Navarrete, R. Juárez, M. Ramos, J.L. Segura

- TÍTULO: New HAT Derivatives: Structure-Spectroscopy Relationships
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **International Workshop on Molecular Materials**
 LUGAR: Sanxenxo (Pontevedra)
 AÑO: 2010
-
- AUTORES: S. Rodríguez González, J. Casado, J.T. López Navarrete, R. Caballero, F. Langa, M. Sato, H. Kamine
 TÍTULO: Raman Mapping of Intrachain Electron Transfer in Mixed Valence Diferrocenyl Oligothiophenes
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **International Workshop on Molecular Materials**
 LUGAR: Sanxenxo (Pontevedra)
 AÑO: 2010
-
- AUTORES: S. Rodríguez González, J. Casado, J. T. López Navarrete, F. Langa, R. Caballero
 TÍTULO: Estudio de la transferencia electrónica en compuesto de valencia mixta mediante espectroscopía Raman
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **VII Simposio de Investigadores Jóvenes de la Real Sociedad Española de Química**
 LUGAR: Valencia
 AÑO: 2010
-
- AUTORES: J.L. Zafra, I.I. Perepichka, I.F. Perepichka, M.R. Bryce, J. Casado, F.J. Ramírez, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: Raman Spectra and Quantum Chemistry Calculations of Fluorene-Dibenzothiophene-S,S-Dioxide Oligomers
 TIPO: Comunicación Oral.
 CONGRESO: **XXII International Conference on Raman Spectroscopy-ICORS**
 LUGAR: Boston (USA)
 AÑO: 2010
-
- AUTORES: R.C. González Cano, M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, J.T. López Navarrete, H. Herrera, J.L. Segura
 TÍTULO: Optical and Conformational Properties of a Thiophenic 3D Dendritic Precursor for Hyperbranched Polythiophenes
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **11th European Conference on Molecular Electronics (ECME)**
 LUGAR: Barcelona
 AÑO: 2011
-
- AUTORES: B. Nieto-Ortega, J. Casado, F.J. Ramírez, G. Henrich, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: On the Sensitivity of Chiro-Optical Spectroscopies to Recognize Supramolecular Structures. The Case of C3 Octopolar Systems.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **11th European Conference on Molecular Electronics (ECME)**
 LUGAR: Barcelona
 AÑO: 2011
-
- AUTORES: J.L. Zafra, J. Casado, D.F. Perepichka, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: Exploring the electronic properties of thienylene-vinylene oligomers pursuing efficient fluorophores
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **11th European Conference on Molecular Electronics (ECME)**
 LUGAR: Barcelona
 AÑO: 2011
-

- AUTORES: R.C. González Cano, M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, J.T. López Navarrete, H. Herrera, J.L. Segura
 TÍTULO: Conformación molecular de oligotiofenos ramificado
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **VIII Simposio de Investigadores Jóvenes de la RSEQ-Sigma Aldrich**
 LUGAR: Torremolinos (Málaga)
 AÑO: 2011
-
- AUTORES: R.Juarez, M. Moreno, M. Ramos, J.L. Segura, M.C. Ruiz Delgado
 J. Casado, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: HAT π -extendidos. Nuevos materiales aceptores de electrones
 TIPO: Comunicación Oral.
 CONGRESO: **VIII Simposio de Investigadores Jóvenes de la RSEQ-Sigma Aldrich**
 LUGAR: Torremolinos (Málaga)
 AÑO: 2011
-
- AUTORES: M. Moreno, J. Casado, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: Moléculas octopolares conjugadas con simetría C_3
 TIPO: Comunicación Oral.
 CONGRESO: **VIII Simposio de Investigadores Jóvenes de la RSEQ-Sigma Aldrich**
 LUGAR: Torremolinos (Málaga)
 AÑO: 2011
-
- AUTORES: J.L. Zafra, J. Casado, D.F. Perepichka, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: Fluoróforos tiofénicos eficientes: base molecular
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **VIII Simposio de Investigadores Jóvenes de la RSEQ-Sigma Aldrich**
 LUGAR: Torremolinos (Málaga)
 AÑO: 2011
-
- AUTORES: R.C. González Cano, M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, J.T. López Navarrete, H. Herrera, J.L. Segura
 TÍTULO: Estructura electrónica de politiofenos por espectroscopía Raman
 TIPO: Comunicación Oral.
 CONGRESO: **XII Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: Benicassim (Castellón)
 AÑO: 2011
-
- AUTORES: J.L. Zafra, J. Casado, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: Planarización de oligotiofenos. Estudio de estructuras quinoides mediante espectroscopía Raman.
 TIPO: Comunicación Oral.
 CONGRESO: **XII Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: Benicassim (Castellón)
 AÑO: 2011
-
- AUTORES: B. Nieto-Ortega, J. Casado, F.J. Ramírez, G. Hennrich, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: Estudio teórico del origen de la actividad Quiro-óptica en sistemas supramoleculares formados por moléculas octopolares C_3
 TIPO: Comunicación Póster y Oral.
 CONGRESO: **XXXIII Reunión Bial de la RSEQ**
 LUGAR: Valencia
 AÑO: 2011
-
- AUTORES: R.C. González Cano, M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, J.T. López Navarrete, H. Herrera, J.L. Segura
 TÍTULO: Propiedades ópticas y conformacionales de un tiofeno dendrimérico tridimensional como precursor de politiofenos ramificados

- TIPO: Comunicación Póster y Oral.
 CONGRESO: **XXXIII Reunión Bienal de la RSEQ**
 LUGAR: Valencia
 AÑO: 2011
-
- AUTORES: J.L. Zafra, J. Casado, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: Exploración de las propiedades electrónicas de oligómeros tienileno-vinilénicos como fluoróforos tiofénicos eficientes
 TIPO: Comunicación Póster y Oral.
 CONGRESO: **XXXIII Reunión Bienal de la RSEQ**
 LUGAR: Valencia
 AÑO: 2011
-
- AUTORES: P.H. Oliveira Neto, D.A. da Silva Filho, M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: Structure-Property Relationships on a Terthienoquinoid Derivative: A DFT Study
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XVI Simposio Brasileiro de Química Teórica-SBQT**
 LUGAR: Ouro Preto-MG (Brasil)
 AÑO: 2011
-
- AUTORES: W. Ferreira da Cunha, D.A. da Silva Filho, M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: Enhanced Deep-blue Photoluminescence in Thienylene Vinylene Derivatives: A theoretical Investigation
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XVI Simposio Brasileiro de Química Teórica-SBQT**
 LUGAR: Ouro Preto-MG (Brasil)
 AÑO: 2011
-
- AUTORES: I. Torres Lima, D.A. da Silva Filho, M.C. Ruiz Delgado, B. Gómez-Lor, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: Electronic Coupling in Triindole Derivatives: A DFT-D Study
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **XVI Simposio Brasileiro de Química Teórica-SBQT**
 LUGAR: Ouro Preto-MG (Brasil)
 AÑO: 2011
-
- AUTORES: S.E. Jorge-Villar, I. Miralles, C. Capel Ferrón, J.T. López Navarrete, V. Hernández.
 TÍTULO: Raman spectroscopy study of three extremophile lichens from the Tabernas Desert (Spain) in relation to the search of bio-markers in extraplanetary exploration missions
 TIPO: Comunicación Oral.
 CONGRESO: GEO-RAMAN Xth MEETING
 LUGAR: Nancy (Francia).
 FECHA: 2012
-
- AUTORES: S.E. Jorge-Villar, C. Capel Ferrón, F.J. Medianero, J. Ramos, G.-C. Weniger, S. Domínguez-Bella, J. Linstaedter, P. Cantalejo, M. Espejo, J.J. Durán, J.T. López Navarrete, V. Hernández.
 TÍTULO: Raman spectroscopy study of Paleolithic stone lamps found in the Ardales Cave (Guadalteba county, Málaga, Spain).
 TIPO: Comunicación Oral.
 CONGRESO: GEO-RAMAN Xth MEETING
 LUGAR: Nancy (Francia).
 FECHA: 2012
-
- AUTORES: C. Capel Ferrón, S.E. Jorge-Villar, F.J. Medianero, J. Ramos, G.-C. Weniger, S. Domínguez-Bella, J. Linstaedter, P. Cantalejo, M. Espejo, J.J. Durán Valsero,

- J.T. López Navarrete, V. Hernández.
- TÍTULO: Raman spectroscopy analysis of Paleolithic stone tools found in the “Las Palomas” and “Ardales” caves (Guadalteba county, Málaga, Spain).
- TIPO: Comunicación Póster.
- CONGRESO: GEO-RAMAN Xth MEETING
- LUGAR: Nancy (Francia).
- FECHA: 2012
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, H. Herrera, C. Seoane, J. L. Segura, P. Mayorga Burrezo, J. Casado, J. Teodomiro López Navarrete, A. Facchetti, Tobin J. Marks
- TÍTULO: Semiconductores orgánicos basados en naftlanos-tiofenos: Comportamiento ambipolar inducido por la planaridad del esqueleto conjugado.
- TIPO: Comunicación Oral.
- CONGRESO: **IX Simposio de Jóvenes Investigadores RSEQ-Sigma Aldrich**
- LUGAR: Zaragoza, España
- AÑO: 2012
-
- AUTORES: R. C. González-Cano, J. Casado, M. C. Ruiz Delgado, G. Saini, J. Jacob, J. T. López Navarrete
- TÍTULO: Flexibilidad en Estructuras Oligotiofénicas Dendriméricas: Estudio Teórico y Caracterización Espectroscópica.
- TIPO: Comunicación Oral.
- CONGRESO: **XIV Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
- LUGAR: Almagro (Ciudad Real)
- AÑO: 2013
-
- AUTORES: R. C. González Cano, M. C. Ruiz Delgado, J. Casado, J.T. López Navarrete
- TÍTULO: Transferencia Competitiva en Uniones α - α y α - β de Oligotiofenos Precursores de Modelos Dendriméricos
- TIPO: Comunicación Póster.
- CONGRESO: **X Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ – Sigma Aldrich**
- LUGAR: Madrid
- AÑO: 2013
-
- AUTORES: P. Mayorga Burrezo, J.T. López Navarrete, J. Casado
- TÍTULO: Estudio de las Interacciones Intermoleculares en Cationes de Base Oligotiofénica. La Espectroscopia Raman como prueba en la Formación de π -Dímeros
- TIPO: Comunicación Oral.
- CONGRESO: **XIV Escuela Nacional de Materiales Moleculares**
- LUGAR: Almagro, Ciudad Real (España)
- AÑO: 2013
-
- AUTORES: M. Peña Alvarez, P. Mayorga, M. Taravillo, E. del Corro, M. Kertesz, S. Yamago, J.T. López Navarrete, J.Casado, V.G. Baonza
- TÍTULO: Response to Stress in Molecular Loops probed by Raman Spectroscopy
- TIPO: Comunicación Oral.
- CONGRESO: **APS-SCCM & AIRAPT 24 Joint Conference**
- LUGAR: Seattle, Washington (EEUU)
- AÑO: 2013
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, H. Herrera, C. Seoane, J. L. Segura, P. Mayorga Burrezo, J. Casado, J. Teodomiro López Navarrete, A. Facchetti, Tobin J. Marks
- TÍTULO: Semiconductores orgánicos basados en naftlanos-tiofenos: Comportamiento ambipolar inducido por la planaridad del esqueleto conjugado.
- TIPO: Comunicación Oral.
- CONGRESO: **IX Simposio de Jóvenes Investigadores RSEQ-Sigma Aldrich**
- LUGAR: Zaragoza, España
- AÑO: 2012
-

- AUTORES: R. Ponce Ortiz, J. Casado, J. Teodomiro López Navarrete.
 TÍTULO: Oligotiofenos Quinoides: Materiales para Electrónica y Espintrónica.
 TIPO: Comunicación Oral.
 CONGRESO: **NANOUCO IV**
 LUGAR: Córdoba, España
 AÑO: 2013
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, P. Mayorga Burrezo, J. Casado, J. Teodomiro López Navarrete, M. K. K. Poduval, T.-K. Kim.
 TÍTULO: Novel Lactam-based Donor-Acceptor Polymers for OTFT and Organic Photovoltaic Applications: Molecular and Electronic Structure Analysis.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **ECME 2013, 12th European Conference on Molecular Electronics**
 LUGAR: Londres, Reino Unido.
 AÑO: 2013
-
- AUTORES: R. Ponce Ortiz, P. Mayorga Burrezo, J. Casado, J. Teodomiro López Navarrete, X. Guo, N. Zhou, A. Facchetti, Tobin J. Marks
 TÍTULO: Donor-Acceptor Polymers for Applications in Organic Electronics and Photovoltaics.
 TIPO: Comunicación Oral.
 CONGRESO: **X Simposio de Jóvenes Investigadores RSEQ-Sigma Aldrich**
 LUGAR: Madrid, España
 AÑO: 2013.
-
- AUTORES: B. Nieto-Ortega, F. Aparicio, F. Nájera, F.J. Ramírez, T. López-Navarrete, J. Casado, L. Sánchez.
 TÍTULO: Influencia de la Atropoisomería en la Organización Helicoidal de Organogeles en Oligo-p-fenilenos
 TIPO: Poster
 CONGRESO: **XXXIV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química.**
 LUGAR: Santander, (España).
 AÑO: 2013.
-
- AUTORES: B. Nieto-Ortega, J.M. Hierrezuelo, C. Carnero-Ruiz, J. Casado, J.T. López-Navarrete, F.J. Ramírez
 TÍTULO: Raman Quiral de Proteínas: El Primer Espectrómetro ROA en España.
 TIPO: Poster
 CONGRESO: **XXXIV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química.**
 LUGAR: Santander, (España).
 AÑO: 2013.
-
- AUTORES: B. Nieto-Ortega, J.M. Hierrezuelo, C. Carnero-Ruiz, J. Casado, J.T. López-Navarrete, F.J. Ramírez
 TÍTULO: La desnaturalización de una proteína globular por surfactantes es monitorizada por espectroscopía Raman quiral.
 TIPO: Poster
 CONGRESO: **XI Simposio de Investigadores Jóvenes. Real Sociedad Española de Química –Sigma Aldrich.**
 LUGAR: Madrid, (España).
 AÑO: 2013.
-
- AUTORES: M. Carmen Ruiz Delgado. Rafael C. González-Cano, G. Saini, J. Jacob, Juan T. López Navarrete, J. Casado
 TÍTULO: Charge delocalization study of branched oligothiophenes as models for 3D dendritic polythiophenes
 TIPO: Comunicación oral.
 CONGRESO: **CpiC4 (4th European Symposium on Computing Pi-Conjugated Compounds)**
 LUGAR: Marsella (Francia)
 AÑO: 2013

AUTORES: M. C. Ruiz Delgado, R. C. González-Cano, G. Saini, J. Jacob, J. Casado, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: Flexibility of Ramified Oligothiophenes in their Neutral and Oxidized States
 TIPO: Comunicación Oral.
 CONGRESO: **XXIX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina**
 LUGAR: Granada (Spain)
 AÑO: 2013

AUTORES: M. Carmen Ruiz Delgado, Rafael C. González Cano, Juan Casado, J.T. López Navarrete
 TÍTULO: ESTUDIO DE ESTADOS EXCITADOS Y DESLOCALIZACIÓN DE CARGA EN OLIGOTIOFENOS RAMIFICADOS
 TIPO: Comunicación Oral.
 CONGRESO: **XXXIV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química**
 LUGAR: Santander (España)
 AÑO: 2013

AUTORES: M. Carmen Ruiz Delgado, C. Capel Ferrón, M. Capdevila-Cortada, Juan J. Novoa, F. Hartl, V. Hernández, J. T. López Navarrete
 TÍTULO: π -Dimerización de Especies Oxidadas en Oligotienoacenos.
 TIPO: Comunicación Póster.
 CONGRESO: **X Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ-2013**
 LUGAR: Madrid (Spain)
 AÑO: 2013

AUTORES: José Luis Zafra Paredes, J. Teodomiro López Navarrete, Jishan Wu, Juan Casado,
 TÍTULO: Nuevos Derivados Birradicalarios Tipo Chichibabin: Modulación del Espín Total del Estado Fundamental
 TIPO: Comunicación Oral
 CONGRESO: **XIV Escuela de Nacional de Materiales Moleculares**
 LUGAR: Almagro, Ciudad Real (España)
 AÑO: 2013

AUTORES: Juan Casado, José Luis Zafra, Jishan Wu, Juan T. López Navarrete
 TÍTULO: Raman Spectroscopy Probes Double Spin Polarization (DSP) in Strongly π -Conjugated Kekulé Diradicals: Spectra of Singlet and Triplet Diradicals
 TIPO: Comunicación Oral
 CONGRESO: **11th International Symposium on Functional π -Electron Systems**
 LUGAR: Arcachon, Aquitaine, France
 AÑO: 2013

Otros méritos o aclaraciones que desee hacer constar

Tesis de Licenciatura, Proyectos de Fin de Carrera y otros Trabajos de Investigación Dirigidos

Tesis de Licenciatura

- 1.- Juan J. Romero Anaya
 "Campo de fuerzas armónico para piridazina" (Tesis de Licenciatura)
 Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga, 1987. Sobresaliente.
- 2.- Juan Soto Martín
 "Espectro vibracional y dinámica reticular de de polímeros conductores de la

electricidad: poli(p-fenileno)". (Tesis de Licenciatura)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga, 1992. Sobresaliente.

3.- Juan Casado Cordón

"Espectro vibracional y campo de fuerzas del amino ácido L-asparagina en estado sólido y disolución". (Tesis de Licenciatura)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga, 1995. Sobresaliente y Premio Extraordinario de Licenciatura.

4.- Jesús Serrano de la Torre.

"Estudio vibracional de oligotiofenos: 2,5-dimetiltiofeno, 3,3'-dimetil-2,2'-oligotiofeno, y 4,4'-dimetil,2,2'-bitiofeno". (Tesis de Licenciatura)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga, 1999. Sobresaliente.

5.- Reyes Malavé Osuna.

"Síntesis y caracterización espectroscópica, electroquímica y químico-cuántica de un nuevo oligotiofeno con potenciales aplicaciones en electrónica molecular". (Tesis de Licenciatura)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2005. Sobresaliente.

Proyectos de Fin de Carrera

1.- Carmen Moreno Castro

"Caracterización espectroscópica, electroquímica y espectroelectroquímica de materiales moleculares electroluminiscentes: oligotiofenos amorfos y cristalinos". (Proyecto de Fin de Carrera)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga, 2001. Matrícula de Honor.

2.- Salvador Delgado Ledesma

"Estudio espectroscópico y modelización químico-cuántica de una serie de cromóforos con propiedades ópticas no lineales conteniendo un ditienotiofeno π -conjugado central". (Proyecto de Fin de Carrera)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2003. Matrícula de Honor.

3.- Rocío Ponce Ortiz

"Estudio electroquímico, espectroelectroquímico y computacional de cromóforos derivados de oligotiofenos fusionados con propiedades redox bipolares".
(Proyecto de Fin de Carrera)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2003. Matrícula de Honor.

4.- Ana Vanessa Cuberos Guzmán

"Estudio espectroscópico, electroquímico, espectroelectroquímico y químico cuántico de una serie de α -oligotiofenos sustituidos con grupos nitrilo". (Proyecto de Fin de Carrera)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2004. Matrícula de Honor.

5.- María del Carmen Rey Merchán.

"Estudio espectroscópico y químico-cuántico de cromóforos para óptica no lineal con un espaciador π -conjugado central tipo 3,4-etilendioxitiofeno o 3,4-dihexiloxitiofeno". (Proyecto de Fin de Carrera)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2004. Matrícula de Honor.

6.- Cristina Soler León.

"Espectroscopías ópticas, cálculos químico-cuánticos y electroquímica de aceptores oligotiofénicos con aplicación en electrónica molecular". (Proyecto de Fin de Carrera)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2004. Matrícula de Honor.

7.- María Moreno Oliva.

"Propiedades electroquímicas y espectroscópicas de moléculas conjugadas con aplicaciones en óptica no lineal: oligotiofenos con perfil de sustitución donador-aceptor". (Proyecto de Fin de Carrera)

- Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2005. Matrícula de Honor.
- 8.– Francesca Lubelli.
"Contributo del gruppo etilendioossido in materiali organici per l'elettronica. Oligotiofeni sostituiti: studio elettrochimico, spettroscopico e computazionale". (Tesi di Laurea)
Politecnico di Milano. Facoltà di Ingegneria. Corso di Laurea in Ingegneria dei Materiali. Mactricola. n° 641792. 2005. Calificación máxima de 8 puntos sobre 8 posibles.
- 9.– Lorenzo Salford.
"Ciclopentaditiofeni con basso gap per l'elettronica molecolare. Studio spettroscopico, elettrochimico e teorico". (Tesi di Laurea)
Politecnico di Milano. Facoltà di Ingegneria. Corso di Laurea in Ingegneria dei Materiali. Mactricola. n° 644165. 2005. Calificación máxima de 8 puntos sobre 8 posibles.
- 10.– Fca. Teresa García Pinos.
"Estructura molecular y electrónica de derivados antracénicos extendidos para fotónica molecular. Estudio espectroscópico, electroquímico y químico cuántico". (Proyecto de Fin de Carrera)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2006. Matrícula de Honor.
- 11.– Sandra Rodríguez González.
"Materiales con aplicaciones en electroluminiscencia: Oligotiofenos-vinilenos extendidos y funcionalizados con grupos dadores y aceptores de electrones. Estudio espectroscópico y computacional". (Proyecto de Fin de Carrera)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2006. Matrícula de Honor.
- 12.– Trinidad Atencia Rico.
"Moléculas octupolares basadas en tiofeno para óptica no lineal. Estudios espectroscópicos y computacionales". (Proyecto de Fin de Carrera)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2007. Matrícula de Honor.
- 13.– Cristina Capel Ferrón.
"Caracterización espectroscópica, electroquímica y computacional de oligotiofenos y oligotienoacenos". (Proyecto de Fin de Carrera)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2007. Matrícula de Honor.
- 14.– Nicolás Martínez León.
"Espectroscopía Raman y electrónica de fluoróforos tiofénicos modificados para LED's orgánicos". (Proyecto de Fin de Carrera)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2007. Matrícula de Honor.
- 15.– José Luís Zafra Paredes
"Compuestos fluorénicos para OLEDs. Propiedades ópticas, electroquímicas y vibracionales". (Proyecto de Fin de Carrera)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2008. Matrícula de Honor.
- 16.– Adoración Pegalajar Jurado
"Estudios para el control del tamaño y forma de nanopartículas en fase cúbica (cubosomas)". (Proyecto de Fin de Carrera. Ponente)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2009. Matrícula de Honor.
- 17.– Belén Nieto Ortega
"Octopolos moleculares quirales: estudios espectroscópicos de agregación molecular y su modelización". (Proyecto de Fin de Carrera)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2009. Matrícula de Honor.
- 18.– Rafael Martín Doménech

"Propiedades optoelectrónicas de oligotiofenos: influencia de la flexibilidad en la conjugación".
(Proyecto de Fin de Carrera)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2010. Matrícula de Honor.

19.– Paula Mayorga Burrezo
"Cación y Dicación birradical en oligotiofenos. Espectroelectroquímica UV-VIS-NIR y Raman".
(Proyecto de Fin de Carrera)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2011. Matrícula de Honor.

20.– Daniel Herrero Carvajal
"Polímeros de tiofenos y fenilenos con electro-aceptores periféricos: estudios por espectroscopias Raman y electrónica y modelización molecular"
(Proyecto de Fin de Carrera)
Facultad de Ciencias. Universidad de Málaga. 2012. Matrícula de Honor.

Estancias de investigación de otros científicos en el grupo:

- Begoña Milián Medina (procedente del Departamento de Química Física, Universidad de Valencia). Estancia de investigación. Noviembre de 2000.
- Alicia Forment Aliaga (procedente del Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Valencia). Estancia de investigación. Noviembre de 2000.
- Lorenzo Salford (procedente del Politécnico de Milán, Italia). Estancia de investigación Erasmus. Septiembre 2004 – Mayo 2005.
- Francesca Lubelli (procedente del Politécnico de Milán, Italia). Estancia de investigación Erasmus. Septiembre 2004 – Mayo 2005.
- Dr. Barbara Vercelli (procedente de CNR Padova, Italia). Estancia de investigación. Mayo-Junio 2007.

Actividades como evaluador

1.- Revisor de revistas científicas

Desde 2005:

- | | | |
|-------------------------------|---|-------------------------------------|
| - Journal Physical Chemistry | - Chemistry. A European Journal | - Journal American Chemical Society |
| - Journal Chemical Physics | - Journal Raman Spectroscopy | - ChemPhysChem |
| - Journal Organic Chemistry | - Canadian Journal Chemistry | - Optical Materials |
| - Journal Molecular Structure | - Electrochimica Acta | - Macromolecules |
| - Dyes and Pigments | - Chemistry Materials | - European J. Organic Chemistry |
| - Acta Chimica Slovenica | - Arabian Journal for Science and Engineering | |

2.- Proyectos y Becas:

- Evaluador de Proyectos de Investigación (de ámbito nacional y autonómico) para la Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva.
- Evaluador de Becas post-doctorales de investigación para la Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva.

Pertenencia a Sociedades Científicas

- Miembro numerario (nº 2488, 2001) de la Real Sociedad Española de Química.
 - * Presidente de la *Sección Territorial de Málaga*.
Desde febrero de 2005 hasta la actualidad. (<http://www.rseq.org/mal.htm>)
 - * Vicepresidente del Grupo Especializado *Nanociencia y Materiales Moleculares*.
Desde abril de 2005 hasta diciembre de 2008. (<http://www.rseq.org/mam.htm>)
 - Miembro numerario (nº 2318509, 2003) de la American Chemical Society (ACS).
-

Reconocimiento y acreditación de la actividad investigadora

- Cuatro tramos por productividad investigadora (**Sexenios**): 1984-1989, 1990-1995, 1996-2001 y 2002-2007.
 - Cinco tramos (máximo) de **Complemento Autonómico de docencia/investigación/gestión**
-

Premios científicos

- Premio de la *European Material Research Society* “Young Scientist Award” al mejor trabajo presentado durante el E-MRS Spring Meeting celebrado en Estrasburgo (FRANCIA) en 1998.
- XVIII Premio de Tesis Doctorales “San Alberto Magno 2000”, concedido a la mejor Tesis Doctoral de Química del año 1999, por el Ilustre Colegio Oficial de Químicos de Andalucía y Extremadura. Tesis Doctoral presentada por Dr. Juan Casado Cordón, titulada: Espectroscopía Vibracional de Sistemas Policonjugados: α -Oligotiofenos en Estados Neutro y Oxidado. Universidad de Málaga, 1999.
- Premio "Doctor Esteban Pérez-Bryan Souvirón", año 2001, para Tesis Doctorales leídas en las Facultades de Medicina y Ciencias de la Universidad de Málaga, concedido por el Ilustre Colegio Oficial de Farmacéuticos de Málaga. Tesis Doctoral presentada por Dr. Juan Casado Cordón, titulada: Espectroscopía Vibracional de Sistemas Policonjugados: α -Oligotiofenos en Estados Neutro y Oxidado. Universidad de Málaga, 1999.
- Premio "NANOMATMOL", año 2006, para Tesis Doctorales leídas por miembros del Grupo Especializado de Nanociencia y Materiales Moleculares de la Real Sociedades de Física y Química. Tesis Doctoral presentada por Dr. M.C. Ruiz Delgado en la Universidad de Málaga, 2006.
- Premio "Doctor Esteban Pérez-Bryan Souvirón", año 2007, para Tesis Doctorales leídas en las Facultades de Medicina y Ciencias de la Universidad de Málaga, concedido por el Ilustre Colegio Oficial de Farmacéuticos de Málaga. Tesis Doctoral presentada por Dr. M.C. Ruiz Delgado, Universidad de Málaga, 2006.
- I Premio de Jóvenes Investigadores de la Fundación de la Universidad de Málaga, modalidad “Severo Ochoa” concedido a Dr. M.C. Ruiz Delgado por el trabajo titulado: “*Combined Raman and Computational Study of a Novel Series of Macrocyclic π -Conjugated Diacetylene-Bridged α -Linked Oligothiophenes*” (publicado por M.C. Ruiz Delgado, J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, G. Fuhrmann, P. Bäuerle en J.Phys.Chem.B 108, 3158, 2004). Diciembre, 2007.

- II Premio de Jóvenes Investigadores de la Fundación de la Universidad de Málaga, modalidad “Severo Ochoa” concedido a Dr. Rocío Ponce Ortiz por el trabajo titulado: “*On the Biradicaloid Nature of Long Quinoidal Oligothiophenes: New Experimental Evidences Guided by Theoretical Studies*” (publicado por R. Ponce Ortiz, J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, P.M. Viruela, E. Ortí, K. Takimiya, T. Otsubo en *Angew.Chem.Int.Ed.* **46**, p. 9057-9061; 2007). Diciembre, 2008.
- Premio "NANOMATMOL", año 2008, para Tesis Doctorales leídas por miembros del Grupo Especializado de Nanociencia y Materiales Moleculares de la Real Sociedades de Física y Química. Tesis Doctoral presentada por Dr. R. Ponce Ortiz en la Universidad de Málaga, 2008.
- III Premio de Jóvenes Investigadores de la Fundación de la Universidad de Málaga, modalidad “Severo Ochoa” concedido a Dr. Reyes Malavé Osuna por publicación del grupo.
- Accesis del IV Premio de Jóvenes Investigadores de la Fundación de la Universidad de Málaga, modalidad “Severo Ochoa” concedido a Dr. María Moreno Oliva por publicación del grupo.
- V Premio de Jóvenes Investigadores de la Fundación de la Universidad de Málaga, modalidad “Severo Ochoa” concedido a Dr. María Moreno Oliva por publicación del grupo.
- Premio "NANOMATMOL", año 2012, para Tesis Doctorales leídas por miembros del Grupo Especializado de Nanociencia y Materiales Moleculares de la Real Sociedades de Física y Química. Tesis Doctoral presentada por Dr. María Moreno Oliva en la Universidad de Málaga, 2011.



**Ministerio de Economía y Competitividad.
Secretaría de Estado de Investigación,
Desarrollo e Innovación**

Currículum

Nombre: María Luisa Moyá Morán

Fecha: Febrero 2014

Actividades anteriores de carácter científico profesional

Puesto	Institución	Fechas
Becaria F.P.I.	Departamento de Química Física, Universidad de Sevilla	01/01/86-31/10/87
Profesor Ayudante	Departamento de Química Física, Universidad de Sevilla	01/11/87-30/09/89
Profesor Asociado Tipo III	Departamento de Química Física, Universidad de Sevilla	01/10/89-30/09/91
Profesor Titular Interino	Departamento de Química Física, Universidad de Sevilla	01/10/91-21/06/93
Profesor Titular de Universidad	Departamento de Química Física, Universidad de Sevilla	22/06/1993-5/02/2009

Asignaturas impartidas en el área de Química Física

<u>Curso Académico</u>	<u>Puesto</u>	<u>Asignatura</u>	<u>Curso</u>	<u>Tipo de Clases</u>
1987-88	Profesor Ayudante	Química Física	3º Química	Laboratorio
1988-89	Profesor Ayudante	Química Física	3º Química	Laboratorio
1989-90	Profesor Asociado	Termodinámica	2º Química	Laboratorio
1990-91	Profesor Asociado	Termodinámica Termodinámica	2º Química 2º Química	Teoría Laboratorio
1991-92	Profesor Titular Int.	Termodinámica Termodinámica Curso de Doctorado	2º Química 2º Química	Teoría Laboratorio
1992-93	Profesor Titular Int.	Termodinámica Termodinámica	2º Química 2º Química	Teoría Laboratorio
1993-94	Profesor Titular	Termodinámica Química Física Ampliación Química Física	2º Química 3º Química 4º Química	Laboratorio Laboratorio Laboratorio
1994-95	Profesor Titular	Química Física Ampliación Química Física	2º Química 4º Química	Laboratorio Laboratorio

1995-96	Profesor Titular	Química General Fisicoquímica Física Industrial	1º Farmacia 2º Farmacia 4º Química	Laboratorio Laboratorio Laboratorio
1996-97	Profesor Titular	Técnicas Instrumentales Termodinámica	3º Farmacia 2º Química	Teoría Laboratorio
1997-98	Profesor Titular	Fisicoquímica Técnicas Instrumentales	2º Farmacia 3º Farmacia	Laboratorio Teoría
1998-99	Profesor Titular	Fundamentos Fisicoquímicos de las Técnicas Instrumentales Fundamentos Fisicoquímicos de las Técnicas Instrumentales Curso de Doctorado	2º Farmacia 2º Farmacia	Teoría Laboratorio
1999-00	Profesor Titular	Química Física Fundamentos Fisicoquímicos de las Técnicas Instrumentales Fundamentos Fisicoquímicos de las Técnicas Instrumentales	3º Química 2º Farmacia 2º Farmacia	Laboratorio Teoría Laboratorio
2000-01	Profesor Titular	Química Física Física Aplicada y Fisicoquímica Fundamentos Fisicoquímicos de las Técnicas Instrumentales Fundamentos Fisicoquímicos de las Técnicas Instrumentales	3º Química 1º Farmacia 2º Farmacia 2º Farmacia	Laboratorio Laboratorio Teoría Laboratorio
2001-02	Profesor Titular	Termodinámica Fundamentos Fisicoquímicos de las Técnicas Instrumentales Fundamentos Fisicoquímicos de las Técnicas Instrumentales	2º Química 2º Farmacia 2º Farmacia	Laboratorio Teoría Laboratorio
2002-03	Profesor Titular	Física Aplicada y Fisicoquímica Física Aplicada y Fisicoquímica	1º Farmacia 1º Farmacia	Teoría Laboratorio
2003-04	Profesor Titular	Fundamentos Fisicoquímicos de las Técnicas Instrumentales Fundamentos Fisicoquímicos de las Técnicas Instrumentales	3º Farmacia 3º Farmacia	Teoría Laboratorio
2004-05	Profesor Titular	Fundamentos Fisicoquímicos de las Técnicas Instrumentales Fundamentos Fisicoquímicos de las Técnicas Instrumentales	3º Farmacia 3º Farmacia	Teoría Laboratorio
	Profesor Titular	Curso de Doctorado	Química	

2005-06	Profesor Titular	Fundamentos Fisicoquímicos de las Técnicas Instrumentales Fundamentos Fisicoquímicos de las Técnicas Instrumentales	3º Farmacia 3º Farmacia	Teoría Laboratorio
2006-07	Profesor Titular	Física Aplicada y Fisicoquímica Laboratorio de Fisicoquímica Experimentación en Química	1º Farmacia Farmacia 5º Química	Laboratorio Optativa T. y L.
2007-08	Profesor Titular	Física Aplicada y Fisicoquímica Laboratorio de Fisicoquímica Experimentación en Química Master en Ciencia, Tecnología Y Uso Racional del Medicamento	1º Farmacia Farmacia 5º Química Farmacia	Laboratorio Optativa T. y L.
2008-09	Profesor Titular Catedrática Univ.	Física Aplicada y Fisicoquímica Laboratorio de Fisicoquímica Experimentación en Química Master en Ciencia, Tecnología Y Uso Racional del Medicamento Master Avanzado en Química	1º Farmacia Farmacia 5º Química Farmacia Química	Laboratorio Optativa T. y L.
2009-10	Catedrática Univ.	Fisicoquímica Master en Ciencia, Tecnología Y Uso Racional del Medicamento Fundamentos Fisicoquímicos de Las Técnicas Instrumentales	1º Farmacia Farmacia 3º Farmacia	Teoría Laboratorio
2010-11	Catedrática Univ.	Fisicoquímica Laboratorio de Fisicoquímica Master en Ciencia, Tecnología Y Uso Racional del Medicamento Fundamentos Fisicoquímicos de Las Técnicas Instrumentales	1º Farmacia Farmacia Farmacia 3º Farmacia	Teoría Optativa Laboratorio
2011-12	Catedrática Univ.	Fisicoquímica Laboratorio de Fisicoquímica Master en Ciencia, Tecnología Y Uso Racional del Medicamento	1º Farmacia Farmacia Farmacia	Teoría y Lab. Optativa
2012-2013	Catedrática Univ.	Fisicoquímica Laboratorio de Fisicoquímica Master en Ciencia, Tecnología Y Uso Racional del Medicamento	1º Farmacia Farmacia Farmacia	Teoría y Lab. Optativa
2013-2014	Catedrática Univ.	Fundamentos Fisicoquímicos de las Técnicas Instrumentales Física Aplicada a las Ciencias de la Salud Master en Especialización Profesional en Farmacia	2º Farmacia 1º Farmacia	Teoría Prácticas

Idiomas (R = regular, B = bien, C = correctamente)

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Inglés	C	C	C
Italiano	B	B	R

Participación en Proyectos de I+D financiados en convocatorias públicas.
(nacionales y/o internacionales)

PROYECTOS I+D (PROMOCIÓN GENERAL DEL CONOCIMIENTO)

TITULO DEL PROYECTO: Efectos del Medio en la Reactividad Química

ENTIDAD FINANCIADORA: C.A.I.C.Y.T. PB85-0357

DURACION, DESDE: 1986 HASTA: 1988

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 4.200.000

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dr. Francisco Sánchez Burgos

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 8

TITULO DEL PROYECTO: Efectos del Disolvente en la Reactividad Química

ENTIDAD FINANCIADORA: DGICYT, PS89-0118

DURACION, DESDE: 1991 HASTA: 1993

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 6.405.000

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dr. Francisco Sánchez Burgos

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 8

TITULO DEL PROYECTO: Efectos del Disolvente en Reacciones de Transferencia
Electrónica

ENTIDAD FINANCIADORA: DGICYT, PB92-0677

DURACION, DESDE: 1994 HASTA: 1996

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 9.000.000

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dr. Francisco Sánchez Burgos

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 8

TITULO DEL PROYECTO: Interacciones Reactivos-Agregados Micelares: Relación entre la
Reactividad y las Características Estructurales en Micelas
Directas y Microemulsiones de Agua en Aceite (W/O)

ENTIDAD FINANCIADORA: DGICYT, PB95-0527

DURACION, DESDE: 1/11/97 HASTA: 1/11/99

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 4.000.000

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra María Luisa Moyá Morán

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 4

TITULO DEL PROYECTO: Importancia de las Interacciones Reactivos-Agregados Micelares y de las Características de dichos Agregados en el Análisis Cuantitativo de Datos Cinéticos en Sistemas Polidispersos

ENTIDAD FINANCIADORA: DGICYT, PB98-1110

DURACION, DESDE: 30/12/00 HASTA:30/12/02

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 3.000.000

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra. María Luisa Moyá Morán

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 5

TITULO DEL PROYECTO: Estudios Cinéticos y Estructurales en Disoluciones Micelares Catiónicas y Zwitteriónicas en Agua-Disolvente Orgánico

ENTIDAD FINANCIADORA: DGICYT, BQU2002-00691

DURACION, DESDE: 1/1/03 HASTA:31/12/05

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 55200 E

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra. María Luisa Moyá Morán

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 5

TITULO DEL PROYECTO: Influencia de Aditivos en los Aspectos Termodinámicos y Estructurales de Disoluciones de Tensioactos Dímeros Catiónicos. Aplicaciones en la Reactividad Química y en Transfección Génica

ENTIDAD FINANCIADORA: DGICYT, CTQ2006-00597

DURACION, DESDE: 1/1/07 HASTA:31/10/09

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 62500 E

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra. María Luisa Moyá Morán

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 4

TITULO DEL PROYECTO: preparación y estudio de nuevos sistemas tensioactivos.

Tensioactivos biodegradables de interés aplicado.

ENTIDAD FINANCIADORA: DGICYT, CTQ2009-07478

DURACION, DESDE: 01/10/2009 HASTA:31/10/2012

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 48.000 E

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra. María Luisa Moyá Morán

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 4

ACCIONES COMPLEMENTARIAS

TITULO DEL PROYECTO: Red Colinter de Transferencia Tecnológica

ENTIDAD FINANCIADORA: Ministerio de Educación y Ciencia CTQ2006-27199-E/PPQ

DURACION: Un año

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 12000 euros

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dr. Roque Hidalgo Alvarez

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 27 grupos de investigación pertenecientes al Grupo Especializado de Coloides e Interfases de la RSEQ

AYUDAS A LA CONSOLIDACIÓN DE GRUPOS DE LA JUNTA DE ANDALUCÍA

TITULO DEL PROYECTO: Grupo de Cinética del Profesor Rodríguez Velasco

ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Educación y Ciencia de la Junta de Andalucía
(FQM-206)

DURACION: Convocatorias anteriores a la de 19 de Agosto de 1997

CUANTÍA DE LA SUBVENCION: En todos los casos fue de 1000.000 pts.

COORDINADOR DEL GRUPO: Dr. Francisco Sánchez Burgos

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 9

TITULO DEL PROYECTO: Cinética Química y Estructura en Sistemas Micelares

ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Educación y Ciencia de la Junta de Andalucía
(FQM-274)

DURACION: Convocatoria de 19 de Agosto de 1997

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 506.423

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra. María Luisa Moyá Morán

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 5

TITULO DEL PROYECTO: Cinética Química y Estructura en Sistemas Micelares

ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Educación y Ciencia de la Junta de Andalucía
(FQM-274)

DURACION: Convocatoria de 20 de Enero de 2001

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 663.063 pts.

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra. María Luisa Moyá Morán

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 5

TITULO DEL PROYECTO: Cinética Química y Estructura en Sistemas Micelares

ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Educación y Ciencia de la Junta de Andalucía
(FQM-274)

DURACION: Convocatoria de 2 de Mayo de 2002

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 3.985 Euros

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra. María Luisa Moyá Morán

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 5

TITULO DEL PROYECTO: Cinética Química y Estructura en Sistemas Micelares

ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Educación y Ciencia de la Junta de Andalucía
(FQM-274)

DURACION: Convocatoria de 11 Junio de 2003

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 5225,04 euros

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra. María Luisa Moyá Morán

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 5

TITULO DEL PROYECTO: Cinética Química y Estructura en Sistemas Micelares

ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Educación y Ciencia de la Junta de Andalucía
(FQM-274)

DURACION: Convocatoria de 2 de Julio de 2004

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 5242,3 euros

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra. María Luisa Moyá Morán

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 5

TITULO DEL PROYECTO: Cinética Química y Estructura en Sistemas Micelares
ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa de la Junta de Andalucía (FQM-274)

DURACION: Convocatoria Grupos de Investigación 2005

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 6776,87 euros

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra. María Luisa Moyá Morán

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 5

TITULO DEL PROYECTO: Cinética Química y Estructura en Sistemas Micelares
ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa de la Junta de Andalucía (FQM-274)

DURACION: Convocatoria Grupos de Investigación 2006

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 8954.72 euros

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra. María Luisa Moyá Morán

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 5

TITULO DEL PROYECTO: Cinética Química y Estructura en Sistemas Micelares
ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa de la Junta de Andalucía (FQM-274)

DURACION: Convocatoria Grupos de Investigación 2007

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 9525,76.40 euros

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra. María Luisa Moyá Morán

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 5

TITULO DEL PROYECTO: Cinética Química y Estructura en Sistemas Micelares
ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa de la Junta de Andalucía (FQM-274)

DURACION: Convocatoria Grupos de Investigación 2008

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 5202.99 euros

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra. María Luisa Moyá Morán

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 5

TITULO DEL PROYECTO: Cinética Química y Estructura en Sistemas Micelares

ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa de la Junta de Andalucía (FQM-274)

DURACION: Convocatoria Grupos de Investigación 2009

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 6227.51 euros

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra. María Luisa Moyá Morán

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 5

TITULO DEL PROYECTO: Cinética Química y Estructura en Sistemas Micelares

ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa de la Junta de Andalucía (FQM-274)

DURACION: Convocatoria Grupos de Investigación 2010

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 2970 euros

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra. María Luisa Moyá Morán

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 5

TITULO DEL PROYECTO: Cinética Química y Estructura en Sistemas Micelares

ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa de la Junta de Andalucía (FQM-274)

DURACION: Convocatoria Grupos de Investigación 2011

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 2963 euros

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra. María Luisa Moyá Morán

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 4

AYUDAS A LAS UNIDADES ESPECIALIZADAS DE INVESTIGACIÓN DE LA JUNTA DE ANDALUCÍA (SÓLO HA HABIDO TRES CONVOCATORIAS)

TITULO DEL PROYECTO: Unidad Especializada de Investigación

ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Educación y Ciencia de la Junta de Andalucía

DURACION: Convocatoria de 20 de Enero de 2001

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 22.040 Euros

COORDINADOR DEL GRUPO: Dr. Ramón Apararicio López

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 23

TITULO DEL PROYECTO: Unidad Especializada de Investigación

ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Educación y Ciencia de la Junta de Andalucía

DURACION: Convocatoria de 3 de Septiembre de 2002

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 23.757 Euros

COORDINADOR DEL GRUPO: Dra. Ana María Cameán Fernández

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 23

TITULO DEL PROYECTO: Unidad Especializada de Investigación

ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Educación y Ciencia de la Junta de Andalucía

DURACION: Convocatoria de 11 de Junio de 2003

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 13633,61 euros

COORDINADOR DEL GRUPO: Dra. Ana María Cameán Fernández

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 28

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN DE EXCELENCIA. JUNTA DE ANDALUCÍA

TITULO DEL PROYECTO: Preparación y estudio de nuevos surfactantes multicatenarios de alto valor añadido a partir de materias primas renovables

ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa

DURACION, DESDE: 01/01/2008 HASTA: 31/12/210

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 90845 euros

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra María Luisa Moyá

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 10

TITULO DEL PROYECTO: Nuevos tensioactivos biodegradables. Estudio de sus propiedades fisicoquímicas y biológicas y de sus interacciones con especies de potencial interés aplicado.

ENTIDAD FINANCIADORA: Consejería de Innovación, Ciencia y Empresa

DURACION, DESDE: 01/01/2014 HASTA: 31/12/2017

CUANTIA DE LA SUBVENCION: 176361 euros

INVESTIGADOR RESPONSABLE: Dra María Luisa Moyá

NUMERO DE INVESTIGADORES PARTICIPANTES: 10

Publicaciones o Documentos Científico-Técnicos

(CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = "review", E = editor,

S = Documento Científico-Técnico restringido.)

1.-AUTORES: M.L. Moyá y F.Sánchez

TITULO: Salt effect in the oxidation of iodide by permanganate

REF. REVISTA/LIBRO: React. Kinet Catal. Lett. 1986, 32, 423-428. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Hungría

2.-AUTORES: F. Sánchez, M. M. Graciani, E. Muñoz, M. L. Moyá, M. J. Capitán, M. Galán y
C. D. Hubbard

TITULO: Kinetic salt effects in the bromide oxidation by bromate

REF. REVISTA/LIBRO: J. Solution Chem. 1988, 17, 653-659. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

3.-AUTORES: F. Sánchez, M. J. Nasarre, M. M. Graciani, R. Jiménez, M. L. Moyá, J. Burgess y
M. J. Blandamer

TITULO: Kinetics of peroxodisulphate oxidation of octacyanomolibdate(IV) in
concentrated aqueous salt solutions

REF. REVISTA/LIBRO: Trans. Met. Chem. 1988, 13, 150-154. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Reino Unido

4.-AUTORES: N. A. Ellis, C. D. Hubbard, S. M. Shirodkar, P. Guardado, M. L. Moyá, F.
Sánchez y J. Burgess

TITULO: Medium effects upon kinetics of formation of nickel(II) and cobalt(II) pyridine 2-
azo dimethylaniline

REF. REVISTA/LIBRO: Trans. Met. Chem. 1989, 14, 466-470. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Reino Unido

5.-AUTORES: A. Rodríguez, M. L. Moyá, P. López y E. Muñoz

TITULO: The formation of the complex pentacyano(3-pyrazincarboxylate)ferrate(II) in various water cosolvent mixtures

REF. REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet. 1990, 22, 1017-1026. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

6.-AUTORES: M. Galán, M. Domínguez, R. Andreu, M. L. Moyá, F. Sánchez y J. Burgess

TITULO: Kinetic salt effects in intramolecular electron transfer

REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1990, 86, 937-940. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Reino Unido

7.-AUTORES: C. Gómez-Herrera, M. M. Graciani, E. Muñoz, M. L. Moyá y F. Sánchez

TITULO: Kinetics of the oxidation of iodide by peroxodisulphate in reverse micelles

REF. REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci. 1990. 141, 454-458. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

8.-AUTORES: M. L. Moyá y A. Rodríguez

TITULO: Solvent dependence of charge-transfer transitions in binary aqueous mixtures

REF. REVISTA/LIBRO: Trans. Met. Chem. 1991, 16, 230-235. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Reino Unido

9.-AUTORES: A. Rodríguez, F. Sánchez, M. L. Moyá, J. Burgess y A. Al-Alousy

TITULO: Solvent dependence of charge-transfer transitions in binary aqueous mixtures as an indicator of preferential solvation

REF. REVISTA/LIBRO: Trans. Met. Chem. 1991, 16, 445-449. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Reino Unido

10.-AUTORES: E. Muñoz, C. Gómez-Herrera, M. M. Graciani, F. Sánchez y M. L. Moyá

TITULO: Kinetics of the oxidation of iodide by persulphate in AOT/oil/water microemulsions

REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1991, 87, 129-132. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Reino Unido

- 11.-AUTORES: M. L. Moyá, C. Izquierdo y J. Casado
TITULO: Microemulsions as a medium in chemical kinetics: The persulphate-iodide reaction.
REF. REVISTA/LIBRO: J. Phys. Chem. 1991, 95, 6001-6004. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 12.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Barrios, M. M. Graciani, R. Jiménez, E. Muñoz, F. Sánchez y J. Burgess
TITULO: Solvent effects in substitution reactions at complexes of the $[\text{Fe}(\text{CN})_5\text{L}]^{3-}$ type in binary aqueous mixtures
REF. REVISTA/LIBRO: Trans. Met. Chem. 1991, 16, 165-168. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Reino Unido
- 13.-AUTORES: I. Tejera, A. Rodríguez, F. Sánchez, M. L. Moyá y J. Burgess
TITULO: Substitution reactions at pentacyanoferrate(II) complexes: Linear free-energy relationships in mixed solvents
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1991, 87, 2573-2577. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Reino Unido
- 14.-AUTORES: M. M. Graciani y M. L. Moyá
TITULO: Association equilibrium constants of the ion-pairs $\text{Co}(\text{en})_3^{3+}/\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ and $\text{Co}(\text{NH}_3)_6^{3+}/\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$ in binary aqueous mixtures
REF. REVISTA/LIBRO: Gazz. Chim. Ital. 1991, 121, 491-494. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Italia
- 15.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez y F. Sánchez
TITULO: Salt effects on charge transfer transitions
REF. REVISTA/LIBRO: Inorg. Chim. Acta 1991, 188, 185-190. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Holanda
- 16.-AUTORES: A. Rodríguez, E. Muñoz, F. Sánchez, M. L. Moyá y J. Burgess

TITULO: Medium effects on the ligand field bands of hexathiocyanatochromate(III)

REF. REVISTA/LIBRO: Trans. Met. Chem. 1992, 17, 5-8. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Reino Unido

17.-AUTORES: A. Rodríguez, F. F. De la Rosa, M. Galán, F. Sánchez y M. L. Moyá

TITULO: Kinetic salt effects in the photochemical reaction between $^*Ru(bpy)_3^{2+}$ and Fe^{3+}

REF. REVISTA/LIBRO: Photochem. Photobiol. 1992, 55, 367-372. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

18.-AUTORES: A. Rodríguez, M. Bejarano, E. Fernández-Boy, M. M. Graciani, F. Sánchez y M. L. Moyá

TITULO: Kinetic study of the oxidation of iodide by hexachloroiridate(IV) in concentrated electrolyte solutions

REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1992, 88, 591-594 CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Reino Unido

19.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez, F. Sánchez, C. Blanco y M. J. Hynes

TITULO: Role of ionic strength in the kinetics of formation of the monochelate of nickel(II) with heptane-3,5-dione

REF. REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet. 1992, 24, 359-368. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

20.-AUTORES: I. Tejera, R. Jiménez, A. Rodríguez, F. Sánchez y M. L. Moyá

TITULO: Medium effects in the kinetics of dissociation of the pentacyano(4,4'-bipyridine)ferrato(II) anion

REF. REVISTA/LIBRO: React. Kinet. Catal. Lett. 1992, 46, 427-434 CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Hungría

21.-AUTORES: E. Fernández-Boy, M. Bejarano, M. M. Graciani, F. Sánchez y M. L. Moyá

TITULO: Salt effects in the reaction between $IrCl_6^{2-}$ and $MnEDTA^{2-}$

REF. REVISTA/LIBRO: React. Kinet. Catal. Lett. 1992, 46, 131-138. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Hungría

- 22.-AUTORES: C. Izquierdo, J. Casado, A. Rodríguez y M. L. Moyá
TITULO: Microemulsions as a medium in chemical kinetics II. The $\Gamma + S_2O_8^{2-}$ and crystal violet + OH^- reactions in different surfactant/oil/water microemulsions
REF. REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet. 1992, 24, 19-30. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 23.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez y F. Sánchez
TITULO: Specific cation-solute interactions as a major contributor to the salt effects on charge-transfer transitions
REF. REVISTA/LIBRO: Inorg. Chim. Acta. 1992, 197, 227-232. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Holanda
- 24.-AUTORES: A. Barrios, M. M: Graciani, R. Jiménez, E. Muñoz, F. Sánchez, M. L. Moyá, S. Alsheri y J. Burgess
TITULO: Salt effects in the kinetics of dissociation of the pentacyano-4-cyanopyridineferrate(II) anion
REF. REVISTA/LIBRO: Trans. Met. Chem. 1992, 17, 231-234. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Reino Unido
- 25.-AUTORES: C. Izquierdo, M. L. Moyá, J. L. Usero y J. Casado
TITULO: Estimation of the aggregation number and core radius of microemulsions
REF. REVISTA/LIBRO: Monats. Chem. 1992, 123, 383-389. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Alemania
- 26.-AUTORES: P. López, A. Rodríguez, C. Gómez-Herrera, F. Sánchez y M. L. Moyá
TITULO: Oxidation of $Fe(CN)_6^{4-}$ by $S_2O_8^{2-}$ in AOT-oil-water microemulsions
REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1992, 88, 2701-2704. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Reino Unido

- 27.-AUTORES: R. Ballardini, M. T. Gandolfi, M. L. Moyá, L. Prodi y V. Balzani
TITULO: Supramolecular photochemistry and photophysics. Adducts of metal complexes with the natural ionophore lasadocid anion
REF. REVISTA/LIBRO: Isr. J. Chem. 1992. 32, 47-51. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Israel
- 28.-AUTORES: A. Al-Alousy, S. Alsheri, J. Burgess, M. M. Graciani, M. L. Moyá, E. Muñoz, A. Rodríguez y F. Sánchez
TITULO: Volumes of activation for dissociation of pentacyanoferrates(II) through pressure and salt effects
REF. REVISTA/LIBRO: Trans. Met. Chem. 1993, 18, 179-181. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Reino Unido
- 29.-AUTORES: P. López, A. Rodríguez, F. Sánchez y M. L. Moyá
TITULO: Study of the reaction $\text{Fe}(\text{CN})_5(4\text{-CNpy})^{3-} + \text{CN}^-$ in various AOT-oil-water microemulsions
REF. REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci. 1993, 159, 53-57. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 30.-AUTORES: M. L. Moyá, J. Burgess y F. Sánchez
TITULO: Solvent effects on binuclear complex formation between aquopentacyanoferrate(II) and tetraamminopyrazinecarboxylatocobalt(III) in binary aqueous mixtures
REF. REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet. 1993, 25, 469-477. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 31.-AUTORES: M. M. Graciani, F. Sánchez, A. Rodríguez y M. L. Moyá
TITULO: Role of the ionic strength in the binuclear complex formation between aquopentacyanoferrate(II) and tetraamminepyrazinecarboxylatocobalt(III) ions
REF. REVISTA/LIBRO: Inorg. Chim. Acta. 1993, 208, 213-217. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Holanda

32.-AUTORES: M. L. Moyá, F. Sánchez y J. Burgess

TITULO: On the importance of specific solvent effects in electron transfer reactions

REF. REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet. 1993, 25, 891-899. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

33.-AUTORES: F. Sánchez, M. L. Moyá y M. Galán

TITULO: Solvent effects on kinetics of electron transfer reactions

REF. REVISTA/LIBRO: Prog. React. Kinet. 1994, 19, 1-43. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Reino Unido

34.-AUTORES: J. Casado, C. Izquierdo, S. Fuentes y M. L. Moyá

TITULO: Microemulsiones, nuevo ámbito de integración en la enseñanza de la química III.
Estudio de la reacción $I + S_2O_8^{2-}$

REF. REVISTA/LIBRO: Propiedades, caracterización y aplicaciones de los sistemas
coloidales. Elvira Ródenas ed., Universidad de Alcalá,
1994, 1-11 CLAVE:CL

LUGAR DE PUBLICACION: España

35.-AUTORES: P. López, A. Rodríguez, E. Muñoz, C. Gómez-Herrera, F. Sánchez y M. L. Moyá

TITULO: Estudio cinético de la reacción $Fe(CN)_4(bpy)^{2-} + S_2O_8^{2-}$ en microemulsiones
AOT-fase orgánica-agua

REF. REVISTA/LIBRO: Propiedades, caracterización y aplicaciones de los sistemas
coloidales. Elvira Rodenas ed., Universidad de Alcalá,
1994, 369-370.

CLAVE:CL

LUGAR DE PUBLICACION: España

36.-AUTORES: E. Muñoz, M. M. Graciani, R. Jiménez, A. Rodríguez, M. L. Moyá y F. Sánchez

TITULO: Salt effects upon reactions of different charge type reactants: Peroxodisulphate

oxidations of $\text{Fe}(\text{CN})_4(\text{bpy})^{2-}$, $\text{cis-Fe}(\text{CN})_2(\text{bpy})_2$ and $\text{Fe}(\text{bpy})_3^{2+}$ and iron(II) oxidation by $\text{Co}(\text{NH}_3)_5\text{Cl}^{2+}$.

REF. REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet. 1994, 26, 299-307. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

37.-AUTORES: P. López, A. Rodríguez, E. Muñoz, C. Gómez-Herrera, F. Sánchez y M. L. Moyá

TITULO: Oxidation of $\text{Fe}(\text{CN})_4(\text{bpy})^{2-}$ by $\text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ in AOT-oil-water microemulsions

REF. REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci. 1994, 166, 503-505. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

38.-AUTORES: R. J. Sindreu, M. L. Moyá, F. Sánchez-Burgos y G. González

TITULO: Solvent effects on the dissociation of aliphatic carboxylic acids in water-N,N-dimethylformamide mixtures: Correlation between acidity constants and solvatochromic parameters

REF. REVISTA/LIBRO: J. Solution Chemistry 1994, 23, 1101-1109. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

39.-AUTORES: M. L. Moyá

TITULO: Reacciones de transferencia electrónica. Tratamiento de Marcus y desarrollos posteriores

REF. REVISTA/LIBRO: Memorias de la Real Academia Sevillana de Ciencias, vol 3
1992-1994, 225-246. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: España

40.-AUTORES: P. López, A. Rodríguez, C. Gómez-Herrera, F. Sánchez y M. L. Moyá

TITULO: Specific interactions in reverse micelles: Oxidation of $\text{Fe}(\text{bpy})_3^{2+}$ by $\text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ in AOT-oil-water microemulsions

REF. REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet. 1995, 27, 525-534. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

41.-AUTORES: F. Sánchez-Burgos, P. Pérez Tejeda y M. L. Moyá

TITULO: Efectos del disolvente en reacciones de transferencia electrónica térmica en la región normal

REF. REVISTA/LIBRO: Libro de Conferencias de la XXV Bienal de la R.S.E.Q. de Vitoria, F. Andrés Ordax, A. Arrizabalaga y R. Barrio eds., 1994, 19-36.

CLAVE:CL

LUGAR DE PUBLICACION: España

42.-AUTORES: A. Rodríguez, P. Pérez-Tejeda, R. Jiménez, F. Sánchez, P. López, J. J. Calvente y M. L. Moyá

TITULO: Ionic strength effects in binary aqueous mixtures: Study of the reaction between $\text{Co(en)}_2(2\text{pzCO}_2)^{2+}$ and $\text{Fe(CN)}_5\text{H}_2\text{O}^{3-}$.

REF. REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet. 1995, 27, 807-815.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

43.-AUTORES: P. Pérez-Tejeda, J. Benko, M. L. Moyá y F. Sánchez

TITULO: Study of the reduction of $\text{Co(NH}_3)_4(\text{pzCO}_2)^{2+}$ by Fe(CN)_6^{4-} in binary aqueous mixtures: An interpretation of solvent effects based on spectroscopic data.

REF. REVISTA/LIBRO: J. Mol. Liqu. 1995, 65, 261-264.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

44.-AUTORES: P. Pérez-Tejeda, P. López, M. L. Moyá, M. Domínguez, E. Carmona, P. Palma y F. Sánchez

TITULO: The use of spectroscopic data for the interpretation of solvent effects on electron transfer reactions

REF. REVISTA/LIBRO: New J. Chem., 1996, 20, 95-100.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Francia-Reino Unido

45.-AUTORES: P. López, F. Sánchez, R. Jiménez, P. Pérez-Tejeda y M. L. Moyá

TITULO: The use of free energy relationships to rationalize kinetic data in complex solvent mixtures

REF. REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet. 1996, 28, 57-60. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

46.-AUTORES: M. Galán, M. M. Graciani, R. Jiménez, M. L. Moyá, E. Muñoz, A. Rodríguez y F. Sánchez

TITULO: Medium effects on the electron transfer reaction between $\text{cis-Co}(\text{NH}_3)_4(\text{H}_2\text{O})_2^{3+}$ and the donors $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$ and $\text{Mo}(\text{CN})_8^{4-}$.

REF. REVISTA/LIBRO: Ber. Bunsenges Phys. Chem. 1996, 100, 470-476. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Alemania

47.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani y M. L. Moyá

TITULO: Micellar and salt effects on the binuclear complex formation between $\text{Fe}(\text{CN})_5\text{H}_2\text{O}^{3-}$ and $\text{Co}(\text{en})_2(\text{pzCO}_2)^{2+}$

REF. REVISTA/LIBRO: Langmuir 1996, 12, 4090-4094. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

48.-AUTORES: R. J. Sindreu, M. L. Moyá, F. Sánchez y A. G. González

TITULO: Kamlet-Taft solvatochromic parameters and E_T polarity of several binary aqueous mixtures

REF. REVISTA/LIBRO: J. Solution Chem. 1996, 25, 289-293. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

49.-AUTORES: P. Pérez-Tejeda, J. Benko, M. López, M. Galán, P. López, M. Domínguez, M. L. Moyá y F. Sánchez

TITULO: Solvent effects on $\text{Co}(\text{NH}_3)_4(\text{pzCO}_2)^{2+}$ - $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$ reaction: an interpretation based on spectroscopic data

REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1996, 92, 1155-1162.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Reino Unido

50.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani, R. J. Balahura y M. L. Moyá

TITULO: Micellar effects on the electron transfer reaction within the ion-pair

Co(NH₃)₅(cyanopiperidine)³⁺/Fe(CN)₆⁴⁻ in micellar systems

REF. REVISTA/LIBRO: J. Phys. Chem. 1996, 100, 16978-16983.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

51.-AUTORES: P. López, F. Sánchez, M. L. Moyá y R. Jiménez

TITULO: Common basis of salt, micelle and microemulsion effects

REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1996, 92, 3381-3384.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

52.-AUTORES: P. López, R. Jiménez, M. L. Moyá, J. Burgess y F. Sánchez

TITULO: Use of the Brønsted equation in the interpretation of micellar effects in kinetics

REF. REVISTA/LIBRO: Langmuir 1997, 12, 4981-4986.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

53.-AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez y M. L. Moyá

TITULO: Study of the ligand substitution reaction Fe(CN)₅H₂O³⁻ + pyrazine in micellar solutions

REF. REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet. 1997, 29, 377-384.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

54.-AUTORES: R. Jiménez, M. M. Graciani, A. Rodriguez, M. L. Moyá, F. Sánchez y P. López-Cornejo

TITULO: Study of the reactions $\Gamma + \text{IrCl}_6^{2-}$ and $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-} + \text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ in micellar solutions

REF. REVISTA/LIBRO: Langmuir 1997, 13, 187-191.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

55.-AUTORES: F. Sánchez, M. L. Moyá, C. Gómez-Herrera, M. C. Carmona y P. López-Cornejo

TITULO: Effect of surfactant addition on the kinetics of the reaction $\text{Fe}(\text{bpy})_3^{2+} + \text{S}_2\text{O}_8^{2-}$

REF. REVISTA/LIBRO: J. Chem. Soc., Faraday Trans. 1997, 93, 2181-2184.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Reino Unido

56.-AUTORES: F. Sánchez, A. Rodríguez, M. L. Moyá, R. Jiménez, C. Gómez-Herrera, C. Yanes y P. López-Cornejo

TITULO: Micellar, microemulsion and salt kinetic effects upon the reaction $\text{Fe}(\text{CN})_2(\text{bpy})_2 + \text{S}_2\text{O}_8^{2-}$

REF. REVISTA/LIBRO: Langmuir 1997, 13, 3084-3089. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

57.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani y M. L. Moyá

TITULO: Micellar effects on the reaction $\text{Fe}(\text{CN})_4(\text{bpy})^{2-} + \text{S}_2\text{O}_8^{2-}$

REF. REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci. 1997, 191, 58-64. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

58.-AUTORES: M. L. Moyá, M. M. Graciani, A. Rodríguez, G. Fernández y M. Muñoz

TITULO: Kinetic studies in micellar media

REF. REVISTA/LIBRO: Current Topics in Colloid and Surface Science, Research Trends, 1997, 1, 157-167 CLAVE:CL

LUGAR DE PUBLICACION: India

59.-AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, G. Fernández y M. L. Moyá

TITULO: Study of ligand substitution reactions involving the $\text{Fe}(\text{CN})_5\text{H}_2\text{O}^{3-}$ ions in surfactant solutions

REF. REVISTA/LIBRO: Langmuir 1997, 13, 4239-4245. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

60.-AUTORES: M. S. Matamoros-Fontela, P. López-Cornejo, P. Pérez, R. Prado-Gotor, R. de la Vega, M. L. Moyá y F. Sánchez

TITULO: A study of the electron transfer reaction between $\text{Fe}(\text{CN})_2(\text{bpy})_2$ and $\text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ in solvent mixtures: The translational component of solvent reorganization

REF. REVISTA/LIBRO: New J. Chem. 1998, 22, 39-44. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Francia-Reino Unido

- 61.-AUTORES: M. Muñoz-Pérez, A. Rodríguez, M. M. Graciani, J. D. Mozo y M. L. Moyá
TITULO: Dehydrochlorination of 1,1,1-trichloro-2,2-bis(p-chlorophenyl)ethane in cationic micellar systems
REF. REVISTA/LIBRO: Langmuir 1998, 14, 3524-3530 CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 62.-AUTORES: M. Muñoz, A. Rodríguez, M. M. Graciani y M. L. Moyá
TITULO: Kinetic effects of added electrolytes on a micelle-modified reaction
REF. REVISTA/LIBRO: Langmuir 1999, 15, 2254-2258. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 63.-AUTORES: G. Fernández, M. M. Graciani, A. Rodríguez, F. Ferranti y M. L. Moyá
TITULO: Influence of changes in the interfacial electrical potential on a ligand substitution reaction in aqueous sodium dodecyl sulfate micellar solutions
REF. REVISTA/LIBRO: Langmuir 1999, 15, 4441-4446. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 64.-AUTORES: M. Muñoz, A. Rodríguez, M. M. Graciani, F. Ortega, M. Vázquez y M. L. Moyá
TITULO: Study of the reaction 1,1,1-trichloro-2,2-bis(p-chlorophenyl)ethane + OH⁻ in nonionic micellar solutions
REF. REVISTA/LIBRO: Langmuir 1999, 15, 7876-7879. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 65.-AUTORES: M. Muñoz, A. Rodríguez, M. M. Graciani y M. L. Moyá
TITULO: Addition of alcohols to a cationic micellar solution and their kinetic effects on two micellar modified reactions
REF. REVISTA/LIBRO: Langmuir 1999, 15, 1588-1590. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 66.-AUTORES: G. Fernández, M. M. Graciani, A. Rodríguez, M. Muñoz y M. L. Moyá

TITULO: Study of the reaction $\text{Fe}(\text{CN})_5(4\text{-CNpy})^{3-} + \text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ in aqueous salt and micellar solutions

REF. REVISTA/LIBRO: Int. J.Chem. Kinet. 1999, 31, 229-235. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

67.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani, A. Guinda, M. Muñoz y M. L. Moyá

TITULO: Study of the dehydrochlorination of DDT in basic media in sulfobetaine aqueous micellar solutions

REF. REVISTA/LIBRO: Langmuir 2000, 16, 3182-3186. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

68.-AUTORES: G. Fernández, M. M. Graciani, A. Rodríguez, M. Muñoz y M. L. Moyá

TITULO: Study of the ligand substitution reaction $\text{Fe}(\text{CN})_5(4\text{-}^t\text{bupy})^{3-} + \text{pyrazine}$ in concentrated aqueous electrolyte solutions: estimation of the activation volume

REF. REVISTA/LIBRO: React. Kinet. Catal. Lett. 2000, 70, 389-394. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Hungría

69.-AUTORES: G. Fernández, M. M. Graciani, A. Rodríguez, M. Muñoz y M. L. Moyá

TITULO: Study of ligand substitution reactions at pentacyanoferrates(II) in aqueous salt and micellar solutions

REF. REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci. 2000, 225, 47-53. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

70.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani, M. Muñoz y M. L. Moyá

TITULO: Study of the bromide oxidation by bromate in zwitterionic micellar solutions

REF. REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet. 2000, 32, 388-394. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

71.-AUTORES: M. Muñoz, A. Rodríguez, M. M. Graciani y M. L. Moyá

TITULO: A kinetic method to estimate dissociation degrees of micellar aggregates in TTAB-alcohol aqueous micellar solutions

REF. REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet. 2000, 32, 204-209. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

72.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani, M. Muñoz y M. L. Moyá

TITULO: Influence of the nature of the cation on the reaction $\text{DDT} + \text{OH}^-$ in sulfobetaine micellar solutions in the presence of added salts

REF. REVISTA/LIBRO: Langmuir 2001, 17, 1860-1863.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

73.-AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, M. Muñoz y M. L. Moyá

TITULO: Study of the reaction 2-(p-nitrophenyl)ethyl bromide + OH^- in sulfobetaine aqueous micellar solutions in the presence and absence of added salts

REF. REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci. 2001, 235, 260-264.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

74.-AUTORES: M. L. Moyá, M. Muñoz, A. Rodríguez, M. M. Graciani y G. Fernández

TITULO: Study of dehydrochlorination reactions in micellar solutions

REF. REVISTA/LIBRO: Handbook of Surfaces and Interfaces of Materials, ed. H. S. Nalwa, Academic Press, 2001, vol. 3, 427-464

CLAVE:CL

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

75.-AUTORES: A. Rodríguez, M. Muñoz, M. M. Graciani, G. Fernández y M. L. Moyá

TITULO: Study of the reaction 1-methoxy-4(methylthio)benzene + IO_4^- :Importance of micellar medium effects

REF. REVISTA/LIBRO: New J. Chem. 2001, 25, 1084-1090.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Francia-Reino Unido

76.-AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, M. Muñoz y M. L. Moyá

TITULO: Study of the reaction $\text{Fe}(\text{CN})_4(\text{bpy})^{2-} + \text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ in sulfobetaine aqueous micellar solutions

REF. REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet. 2001, 33, 225-231.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

- 77.-AUTORES: G. Fernández, M. M. Graciani, A. Rodríguez, M. Muñoz y M. L. Moyá
TITULO: Inorganic substitution reactions in aqueous surfactant solutions
REF. REVISTA/LIBRO: Encyclopedia of Surface and Colloid Science 2002, ed. A. Hubbard, Marcel Dekker, 2541-2549 CLAVE:CL
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 78.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani, M. Muñoz y M. L. Moyá
TITULO: Kinetic micellar effects in tetradecyltrimethylammonium bromide-pentanol micellar solutions
REF. REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci. 2002,248, 455-461 CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 79.-AUTORES: M. Muñoz, A. Rodríguez, M. M. Graciani y M. L. Moyá
TITULO: Micellar medium effects on the hydrolysis of phenyl chloroformate in ionic, zwitterionic, nonionic and mixed micellar solutions
REF. REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet., 2002, 34,445-451. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 80.-AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, M. Muñoz y M. L. Moyá
TITULO: Kinetic effects in nonionic micellar solutions
REF. REVISTA/LIBRO: React. Kinet. Catal. Lett., 2002,7,11-18. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Hungría
- 81.-AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, M. Muñoz y M. L. Moyá
TITULO: The reaction methyl 4-nitrobenzenesulfonate + Br⁻ in cationic and zwitterionic micellar solutions
REF. REVISTA/LIBRO: Langmuir, 2002,18,3476-3481. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 82.-AUTORES: G. Fernández, A. Rodríguez, M M. Graciani, M. Muñoz, y M. L. Moyá
TITULO: Study of the reaction methyl 4- nitrobenzenesulfonate + Cl⁻ in mixed hexadecyltrimethylammonium chloride- Triton X-100 micellar solution

- REF. REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet 2003, 35, 1-7. CLAVE: A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 83.- AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, M. Muñoz y M. L. Moyá
TITULO: Study of the 1-chloro-2,4-dinitrobenzene + OH⁻ reaction in
tetradecyltrimethylammonium bromide aqueous micellar solutions
REF. REVISTA/LIBRO: React. Kinetic. Catal. Lett. 2003, 78, 113-119. CLAVE: A
LUGAR DE PUBLICACION: Hungría
- 84.- AUTORES: M. Muñoz, M. M. Graciani, A. Rodríguez y M. L. Moyá
TITULO: Influence of the addition of alcohol on the reaction methyl 4-nitrobenzenesulfonate
+ Br⁻ in tetradecyltrimethylammonium bromide aqueous micellar solutions
REF. REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci. 2003, 266, 208-214 CLAVE: A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 85.- AUTORES: A. Rodríguez, M. Muñoz, M. M. Graciani y M. L. Moyá
TITULO: Water-ethylene glycol alkyltrimethylammonium micellar solutions as reaction
media: Study of spontaneous hydrolysis of phenyl chloroformate
REF. REVISTA/LIBRO: Langmuir 2003, 19, 7206-7213 CLAVE: A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 86.- AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, M. Muñoz y M. L. Moyá
TITULO: Water-ethylene glycol alkyltrimethylammonium micellar solutions as reaction
media: Study of the reaction methyl 4-nitrobenzenesulfonate + Br⁻
REF. REVISTA/LIBRO: Langmuir 2003, 19, 8685-8691. CLAVE: A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 87.- AUTORES: M. L. Moyá, M. M. Graciani, A. Rodríguez y M. Muñoz
TITULO: Water-ethylene glycol alkyltrimethylammonium micellar solutions as reaction
media: Study of the reaction methyl 4-nitrobenzenesulfonate + Br⁻
REF. REVISTA/LIBRO: Recent Developments in Colloid Interface Science 2003, 1, 383-
391. CLAVE: CL

LUGAR DE PUBLICACION: India

88.- AUTORES: M. Muñoz, M. M. Graciani, A. Rodríguez y M. L. Moyá

TITULO: Effects of alcohols on the micellization and on the reaction methyl 4-nitrobenzenesulfonate + Br⁻ in cetyltrimethylammonium bromide aqueous micellar solutions

REF.REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet. 2004, 36, 634-641.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

89.- AUTORES: A. Rodríguez, M. Muñoz, M. M. Graciani, S. Fernández Pachón y M. L. Moyá

TITULO: Kinetic study in water-ethylene glycol cationic, zwitterionic, nonionic, and anionic micellar solutions

REF.REVISTA/LIBRO: Langmuir 2004, 20, 9945-9952

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

90.- AUTORES: M. Muñoz, A. Rodríguez, M. M. Graciani y M. L. Moyá

TITULO: Conductimetric, surface tension and kinetic studies in mixed SDS-Tween 20 and SDS-SB3-14 micellar solutions

REF.REVISTA/LIBRO: Langmuir 2004, 20, 10858-10867

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

91.- AUTORES: M. M. Graciani, M. Muñoz, A. Rodríguez y M. L. Moyá

TITULO: Water-N,N-dimethylformamide alkyltrimethylammonium bromide micellar solutions: thermodynamic, structural, and kinetic studies

REF.REVISTA/LIBRO: Langmuir 2005, 21, 3303-3310

CLAVE: A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

92.- AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, M. Muñoz y M. L. Moyá

TITULO: Micellar solutions of sulfobetaine surfactants in water-ethylene glycol mixtures: surface tension, fluorescence, spectroscopic, conductimetric and kinetic studies

REF.REVISTA/LIBRO: Langmuir 2005, 21, 7161-7169.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

93.- AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez, M. M. Graciani, M. Muñoz y G. Fernández

TITULO: Kinetic studies in zwitterionic micellar solutions

REF. REVISTA/LIBRO: Encyclopedia of Surface and Colloid Science 2006, ed.
Somasundaran, Marcel Dekker, 3176-3191. CLAVE:CL

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

94.- AUTORES: A. Rodríguez, M. Muñoz, M. M. Graciani y M. L. Moyá

TITULO: Role of the counterion in the effects of added ethylene glycol to aqueous
alkyltrimethylammonium micellar solutions

REF. REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci. 2006, 298, 942-951. CLAVE: A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

95.-AUTORES: M. L. Moyá, S. Escalera, C. Martín, A. Rodríguez, M. Muñoz y M. M. Graciani

TITULO: Reaction of methyl 4-nitrobenzenesulfonate with Br⁻ in water-formamide
tetradecyltrimethylammonium bromide micellar solutions

REF. REVISTA/LIBRO: React. Kinet. Catal. Letter 2006, 89, 177-182. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

96.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani, M. Muñoz, I. Robina y M. L. Moyá

TITULO: Effects of ethylene glycol addition on the aggregation and micellar growth of
gemini surfactants

REF. REVISTA/LIBRO: Langmuir 2006, 22, 9519-9525. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

97.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez, M. Muñoz, M. M. Graciani y G. Fernández

TITULO: Study of the bromide ion reaction with methyl naphthalene-2-sulfonate in water-
DMSO TTAB micellar solutions

REF. REVISTA/LIBRO: J. Phys. Org. Chem. 2006, 676-682. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

98.-AUTORES: D. Villaño, M. S. Fernández-Pachón, M. L. Moyá, A. M. Troncoso y M. C. García Parrilla

TITULO: Radical scavenging ability of poliphenolic compounds towards DPPH free radical

REF.REVISTA/LIBRO: Talanta 2007, 71, 230-235. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Holanda

99.-AUTORES: A. Rodríguez, M. Muñoz, M. M. Graciani, M. S. Fernández-Pachón y M. L. Moyá

TITULO: Effects of head group size on micellization of cetyltrialkylammonium bromide surfactants in water-ethylene glycol mixtures.

REF.REVISTA/LIBRO: Coll. Surf. A 2007, 298, 177-185 CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Holanda

100.-AUTORES: A. Rodríguez, M. Muñoz, M. M. Graciani y M. L. Moyá

TITULO: Effect of head group size in the reaction methyl 4-nitrobenzenesulfonate + Br⁻ in cetyltrialkylammonium bromide water-ethylene glycol micellar solutions

REF.REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet. 2007, 39, 346-352 CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

101.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani, K. Bittermann, A. T. Carmona y M. L. Moyá

TITULO: Micellar kinetic effects in gemini micellar solutions. Effects of sphere-to-rod transitions on kinetics

REF.REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci. 2007, 313, 547-550. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

102.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez, M. M. Graciani y G. Fernández

TITULO: Role of the solvophobic effect on micellization

REF.REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci. 2007, 316, 787-795. CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

103.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani, M. Angulo y M. L. Moyá

TITULO: Effects of organic solvent addition on the aggregation and micellar growth of the cationic dimeric surfactant 12-3-12,2Br⁺

REF.REVISTA/LIBRO: Langmuir 2007, 23, 11496-11506

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

104.-AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, G. Fernández, M. Muñoz y M. L. Moyá

TITULO: Study of the reaction methyl 4-nitrobenzenesulfonate + Br⁻ in water-glycerol cationic micellar solutions

REF.REVISTA/LIBRO: Int. J. Chem. Kinet. 2008, 40, 845-852.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

105.- AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani y M. L. Moyá

TITULO: Effects of addition of polar organic solvents on micellization

REF.REVISTA/LIBRO: Langmuir 2008, 24, 12785-12792.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

106.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani y M. L. Moyá

TITULO: Study of the reaction between methyl 4-nitrobenzenesulfonate and bromide ions in mixed single-chain-gemini micellar solutions: Kinetic evidence for morphological transitions

REF.REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci. 2008, 328, 324-330.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

107.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani, A. J. Moreno-Vargas y M. L. Moyá

TITULO: Mixtures of monomeric and dimeric surfactants: Hydrophobic chain length and spacer group length effects on nonideality

REF.REVISTA/LIBRO: J. Phys. Chem. B 2008, 112, 11942-11949.

CLAVE:A

LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

- 108.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez, M. M. Graciani y G. Fernández
TITULO: Kinetic studies as a tool in the investigation of micellar solutions
REF.REVISTA/LIBRO: Research Trends in Catalysis 2009, vol.7, 43-53. CLAVE:CL
LUGAR DE PUBLICACION: India
- 109.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani, G. Fernández y M. L. Moyá
TITULO: Effects of glycols on the thermodynamic and micelle properties of TTAB in water
REF.REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci. 2009, 338, 207-215. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 110.- AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani, Felipe Cordobés y M. L. Moyá
TITULO: Water-ethylene glycol cationic dimeric micelle solutions. Aggregation, micelle growth and characteristics as reaction media
REF.REVISTA/LIBRO: J. Phys. Chem. B 2009, 113, 7767-7779. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 111.-AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, V. I. Martín y M. L. Moyá
TITULO: Micellization and micelle growth of alkenediyl- α - ω -bis(dodecyldimethylammonium)bromide surfactants in the presence of medium chain alcohols.
REF.REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci. 2010, 342, 382-391. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 112.-AUTORES: V. I Martín, A. Rodríguez, M. M. Graciani, I. Robina y M. L. Moyá
TITULO: Study of the micellization and micellar growth in pure alkanediyl- α - ω -bis(dodecyldimethylammonium) bromide and MEGA10 surfactant solutions and their mixtures. Influence of the spacer on the enthalpy change accompanying sphere-to-rod transitions
REF.REVISTA/LIBRO: J. Phys. Chem. B 2010, 114, 7817-7829. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos

- 113.-AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, V. I. Martín, G. Fernández y M. L. Moyá
TITULO: Concentration and medium micellar kinetic effects caused by morphological transitions
REF.REVISTA/LIBRO: Langmuir 2010, 26, 18659-18668. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 114.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez, M. M. Graciani y V. I. Martín
TITULO: Micellization in water-polar organic solvent binary mixtures
REF.REVISTA/LIBRO: Curr. Phys. Chem. 2011, I, 352-368. CLAVE:R
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 115.-AUTORES: V. I. Martín; A. Rodríguez, M. M. Graciani, I. Robina, A. Carmona y M. L. Moyá
TITULO: Physicochemical characterization of bromide mono- and dimeric surfactants with phenyl and cyclohexyl rings in the head group
REF.REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci. 2011, 363, 284-294. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 116.-AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, V. I. Martín y M. L. Moyá
TITULO: Study of the reaction 2-(p-nitrophenyl)ethyl bromide + OH⁻ in dimeric micellar solutions
REF.REVISTA/LIBRO: Molecules 2011, 16, 9467-9479 CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Suiza
- 117.-AUTORES: V. I. Martín, A. Rodríguez, M. M. Graciani y M. L. Moyá
TITULO: Binary mixtures with novel monomeric and dimeric surfactants: Influence of the head group nature and number of hydrophobic chains on non-ideality
REF.REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci. 2012, 368, 326-335 CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Holanda

- 118.-AUTORES: V. I. Martín, M. M. Graciani, A. Rodríguez y M. L. Moyá
TITULO: Kinetic studies in micellar solutions of novel bromide mono- and dimeric surfactants with phenyl and cyclohexyl rings in the head group
REF.REVISTA/LIBRO: Colloid Surf. A 2012, 409, 52-60 CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Holanda
- 119.-AUTORES: R. Domínguez, A. Maestre, A. Rodríguez, I. Robina y M. L. Moyá
TITULO: Synthesis and physicochemical characterization of alkanedyl- α,ω -bis(dimethyldodecylammonium) bromide, 12-s-12, surfactants with s=7, 9, 11 in aqueous medium
REF.REVISTA/LIBRO: J. Colloid Interface Sci. 2012, 386, 228-239. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 120.-AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, V. I. Martín y M. L. Moyá
TITULO: Study of the SN2 substitution reaction between methyl naphthalene-2-sulfonate and methyl 4-nitrobenzene sulfonate and bromide ions in didodecyl dibromide dimeric micellar Solutions in the presence and absence of alcohols
REF.REVISTA/LIBRO: J. Surf. Det. 2012, 15, 235-244. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Alemania
- 121.-AUTORES: M. I. Rodríguez-Naranjo, M. L. Moyá, E. Cantos-Villar y M. C. García-Parrilla
TITULO: Comparative evaluation of the antioxidant activity of malatonine and related indoles
REF.REVISTA/LIBRO: J. Food Comp. Anal. 2012, 28, 16-22. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Holanda
- 122.-AUTORES: V. I. Martín, A. Rodríguez, P. López y M. L. Moyá
TITULO: Role of the spacer in the non-ideal behavior of alkanedyl- α,ω -bis(dimethyldodecylammonium) bromide-MEGA 10 binary mixtures
REF.REVISTA/LIBRO: Colloid Surfaces A 2013, 418, 139-146. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Holanda

- 123.-AUTORES: V. I. Martín, A. Rodríguez, A. Maestre y M. L. Moyá
TITULO: Binding of cationic single-chain/dimeric surfactants to bovine serum albumin
REF.REVISTA/LIBRO: Langmuir 2013, 29, 7629-7641. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 124.-AUTORES: M. López-López, F. Montilla, M. Olivares, J. A. Lebrón, M. L. Moyá, P. López-Cornejo
TITULO: Interaction between monomers of two surfactants derived from $[\text{Ru}(2,2'\text{-bpy})_3]^{2+}$ complex and α , β , and γ -cyclodextrins: formation of [2]- and [3]-pseudorotaxanes
REF.REVISTA/LIBRO: Dalton Trans. 2013, 42, 6171-6181. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Reino Unido
- 125.- AUTORES: V. I. Martín, R. R. de la Haba, A. Ventosa, E. Congiu, J. J. Ortega-Calvo, M. L. Moyá
TITULO: Colloidal and biological properties of single-chain and dimeric surfactants
REF.REVISTA/LIBRO: Colloid Surf. B 2104, 114, 247-254. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Holanda
- 126.- AUTORES: A. Maestre, P. Guardado y M. L. Moyá
TITULO: Thermodynamic study of bile salts micellization
REF.REVISTA/LIBRO: J. Chem. Eng. Data 2104, 59, 433-438. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Estados Unidos
- 127.- AUTORES: J. P. García, E. Marrón, V. I. Martín, M. L. Moyá y P. López
TITULO: Conformational changes of DNA in the presence of 12-s-12 gemini surfactants (s=2 and 10). Role of the spacer's length in the interaction surfactant-polynucleotide
REF.REVISTA/LIBRO: Colloid Surf. B in press. CLAVE:A
LUGAR DE PUBLICACION: Holanda

Participación en contratos de I+D de especial relevancia con Empresas y/o Administraciones

(nacionales y/o internacionales)

Título del contrato/proyecto:

Tipo de contrato:

Empresa/Administración financiadora:

Entidades participantes:

Duración, desde: hasta:

Investigador responsable:

Número de investigadores participantes:

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO:

Título del contrato/proyecto:

Tipo de contrato:

Empresa/Administración financiadora:

Entidades participantes:

Duración, desde: hasta:

Investigador responsable:

Número de investigadores participantes:

PRECIO TOTAL DEL PROYECTO:

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Patentes y Modelos de utilidad

Inventores (p.o. de firma):

Título:

N. de solicitud:

País de prioridad:

Fecha de prioridad:

Entidad titular:

Países a los que se ha extendido:

Empresa/s que la están explotando:

Inventores (p.o. de firma):

Título:

N. de solicitud:

País de prioridad:

Fecha de prioridad:

Entidad titular:

Países a los que se ha extendido:

Empresa/s que la están explotando:

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

**Estancias en otros Centros
(estancias continuadas superiores a un mes)**

CLAVE: D = doctorado, P = postdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras (especificar).

CENTRO: Department of Chemistry

LOCALIDAD: Leicester PAIS: Gran Bretaña

FECHA, DESDE: 16/04/1986 HASTA: 16/06/1986 DURACION: 2 meses

TEMA: Estudio de la síntesis de complejos de metales de transición

DIRECTOR DE LA INVESTIGACION: Dr. John Burgess CLAVE: D

CENTRO: Dipartimento di Chimica "G. Ciamician"

LOCALIDAD: Bolonia PAIS: Italia

FECHA, DESDE: 01/04/1989 HASTA: 31/07/1989 DURACION: 4 meses

TEMA: Estudio de reacciones de transferencia electrónica entre complejos de metales de transición con participación de especies excitadas

DIRECTOR DE LA INVESTIGACION: Professor Vincenzo Balzani CLAVE: P

CENTRO: Departamento de Química Física

LOCALIDAD: Salamanca PAIS: España

FECHA, DESDE: 01/01/1990 HASTA: 30/06/1990 DURACION: 6 meses

TEMA: Estudio de la reactividad química en sistemas micelares inversos

DIRECTOR DE LA INVESTIGACION: Dr. Julio Casado Linarejos CLAVE: P

Contribuciones a Congresos

1.-AUTORES: F. Sánchez Burgos, M. M. Graciani, E. Muñoz, M. L. Moyá, M. J. Capitan,
M. Galán y C. Hubbard

TITULO: Kinetic salt effects in the oxidation of bromide ions by bromate ions

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

CONGRESO: Eighth International Symposium on solute-solute-solvent interactions

CARÁCTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

FECHA: Agosto 1987 LUGAR DE CELEBRACION: Regensburg (Alemania)

2.-AUTORES: F. Sánchez, M. J. Nasarre, M. M. Graciani, R. Jiménez y M. L. Moyá

TITULO: Efecto salino en la cinética de oxidación del octacianomolibdato(IV) con
peroxodisulfato

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

CARÁCTER: Nacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: XXII Reunión Bienal de la R.S. E.Q.

FECHA: Septiembre 1988 LUGAR DE CELEBRACION: Murcia (España)

3.-AUTORES: F. Sánchez, M. M. Graciani, M. L. Moyá y J. Benítez

TITULO: Efecto cinético salino sobre la reacción $I^- + MnO_4^-$ en medio alcalino y
débilmente ácido

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

CARÁCTER: Nacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: XXII Reunión bienal de la R.S.E.Q.

FECHA: Septiembre 1988 LUGAR DE CELEBRACION: Murcia (España)

4.-AUTORES: M. T. Gandolfi, R. Ballardini, M. L. Moyá, T. Zappi y V. Balzani

TITULO: Effects of lasadocid ion on the luminescence of $Cr(bpy)_3(PF_6)_3$

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

CARÁCTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: Interdisciplinary Meeting on Luminescence Fundamentals and
Applications

FECHA: Mayo 1989

LUGAR DE CELEBRACION: Bolonia (Italia)

5.-AUTORES: M. L. Moyá, M. T. Gandolfi, R. Ballardini y V. Balzani

TITULO: Effects of lasadocid ion on the luminescence of chromium polypiridine complexes

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

CARÁCTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: Joint Meeting of the Italian and French Photochemistry Groups

FECHA: Octubre 1989

LUGAR DE CELEBRACION: La Baume-Les-Aix
(Francia)

6.-AUTORES: F. Sánchez, A. Rodríguez, M. L. Moyá y C. D. Hubbard

TITULO: Medium effects upon the kinetics of formation of nickel(II) and cobalt(II) 2-azo-p-dimethylaniline

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

CARÁCTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: FRIS' 89 (Fast Reactions in Solution Discussion Group Meeting)

FECHA: Septiembre 1989

LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de
Compostela (España)

7.-AUTORES: F. Sánchez, M. L. Moyá y J. Burgess

TITULO: Medium effects in the reaction of formation of a binuclear complex between $\text{Fe}(\text{CN})_5(\text{H}_2\text{O})^{3-}$ and $\text{Co}(\text{NH}_3)_4(\text{pzCO}_2)^{2+}$.

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

CARÁCTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: FRIS' 89

FECHA: Septiembre 1989

LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de
Compostela (España)

8.-AUTORES: M. L. Moyá, M. Domínguez, R. Andreu, F. Sánchez y J. Burgess

TITULO: Medium effects on intramolecular electron transfer reactions

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

CARÁCTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: Fifth International Conference on Mechanisms of Reactions in Solution

FECHA: Julio 1990

LUGAR DE CELEBRACION: Canterbury (Reino Unido)

9.-AUTORES: M. Galán, A. Domínguez, R. Andreu, M. L. Moyá, F. Sánchez y J. Burgess

TITULO: Kinetic salt effects in intramolecular electron transfer

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

CARÁCTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: Fifth International Conference on mechanisms of Reactions in Solution

FECHA: Julio 1990

LUGAR DE CELEBRACION: Canterbury (Reino Unido)

10.-AUTORES: A. Rodríguez, E. Muñoz, M. L. Moyá y P. López

TITULO: The formation of the complex pentacyano(4-pyrazinecarboxylato)ferrate(II) in various water cosolvent mixtures

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación oral

CARÁCTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: Fifth International Conference on mechanisms of Reactions in Solution

FECHA: Julio 1990

LUGAR DE CELEBRACION: Canterbury (Reino Unido)

11.-AUTORES: A. Barrios, M. M. Graciani, R. Jiménez, M. L. Moyá, E. Muñoz, A. Rodríguez y F. Sánchez

TITULO: Effects of salt, cosolvent and pressure on rate constants for dissociative substitution at pentacyanoferrates(II)

CARÁCTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: Fifth International Conference on Mechanisms of Reactions in Solution

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

FECHA: Julio 1990

LUGAR DE CELEBRACION: Canterbury (Reino Unido)

12.-AUTORES: A. Rodríguez y M. L. Moyá

TITULO: Efectos del medio sobre bandas de transferencia de carga en mezclas agua-

codisolvente orgánico

CARÁCTER: Nacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: XXIII Reunión Bienal de la R.S.E.Q.

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

FECHA: Septiembre 1990

LUGAR DE CELEBRACION: Salamanca (España)

13.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez y F. Sánchez

TITULO: Efectos salinos sobre las bandas de transferencia de carga en disoluciones concentradas de electrolitos

CARÁCTER: Nacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: XXIII Reunión Bienal de la R.S.E.Q.

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

FECHA: Septiembre 1990

LUGAR DE CELEBRACION: Salamanca (España)

14.-AUTORES: S. Fuentes, M. L. Moyá y J. Casado

TITULO: Las microemulsiones como medio en Cinética Química: reacción ioduro-persulfato

CARÁCTER: Nacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: XXIII Reunión Bienal de la R.S.E.Q.

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

FECHA: Septiembre 1990

LUGAR DE CELEBRACION: Salamanca (España)

15.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez, F. F. De la Rosa, M. Galán y F. Sánchez

TITULO: Kinetic salt effects in the photochemical reaction between $^*Ru(bpy)_3^{2+}$ and Fe^{3+}

CARÁCTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: VIIth International Congress on Quantum Chemistry Satellite Electron Transfer

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

FECHA: Junio 1991

LUGAR DE CELEBRACION: Sophia Antipolis (Francia)

16.-AUTORES: A. Rodríguez, F. Sánchez, M. C. Carmona, E. Muñoz, M. L. Moyá y J.

Burgess

TITULO: Solvent effects upon the reactions between ions: $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-} + \text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ and $\text{SO}_3^{2-} + \text{Fe}(\text{CN})_6^{3-}$

CARÁCTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: VIIIth International Congress on Quantum Chemistry Satellite Electron Transfer

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

FECHA: Junio 1991

LUGAR DE CELEBRACION: Sophia Antipolis (Francia)

17.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez, C. Izquierdo y J. Casado

TITULO: Microemulsions as a medium in chemical kinetics. The $\text{I} + \text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ and crystal violet + OH^- reactions in various surfactant/Oil/Water microemulsions

CARÁCTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: XII ECIS

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

FECHA: Julio 1992

LUGAR DE CELEBRACION: Lund (Suecia)

18.-AUTORES: P. López, A. Rodríguez, C. Gómez-Herrera, M. L. Moyá y F. Sánchez

TITULO: The oxidation of $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-} + \text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ in AOT/Oil/Water microemulsions

CARÁCTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: XII ECIS

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

FECHA: Julio 1992

LUGAR DE CELEBRACION: Lund (Suecia)

19.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez, F. Sánchez, C. Blanco y M. Hynes

TITULO: Role of ionic strength in the kinetics of formation of the monochelate of nickel(II) with heptane-3,5- dione

CARÁCTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: FRIS' 92

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

FECHA: Septiembre 1992

LUGAR DE CELEBRACION: Erlangen (Alemania)

20.-AUTORES: A. Rodríguez, M. Bejarano, E. Fernández-Boy, M. M. Graciani, F. Sánchez y M. L. Moyá

TITULO: Kinetic study of the oxidation of iodide by hexachloroiridate(IV) in concentrated electrolyte solutions

CARÁCTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: FRIS' 92

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

FECHA: Septiembre 1992

LUGAR DE CELEBRACION: Erlangen (Alemania)

21.-AUTORES: P. López, A. Rodríguez, E. Muñoz, C. Gómez-Herera, F. Sánchez y M. L. Moyá

TITULO: Estudio cinético de la reacción $\text{Fe}(\text{bpy})(\text{CN})_4^{2-} + \text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ en microemulsiones AOT-fase orgánica-agua

CARÁCTER: Nacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: 1ª Reunión Nacional del Grupo de Coloides e Interfases

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación oral

FECHA: Julio 1993

LUGAR DE CELEBRACION: Alcalá de Henares (España)

22.-AUTORES: F. Sánchez, E. Muñoz, M. M. Graciani, R. Jiménez, A. Rodríguez y M. L. Moyá

TITULO: Role of ion pairs in kinetic salt effects

CARÁCTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: 23rd International IUPAC Conference on Solution Chemistry

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

FECHA: Agosto 1993

LUGAR DE CELEBRACION: Leicester (Reino Unido)

23.-AUTORES: P. Pérez, A. Rodríguez, F. Sánchez y M. L. Moyá

TITULO: Solvent effects on binuclear complex formation between aquopentacyanoferrate and bis(ethylenediamine)pyrazinecarboxylatocobalt in binary aqueous mixtures

CARÁCTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: FRIS' 94
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
FECHA: Septiembre 1994 LUGAR DE CELEBRACION: Burgos (España)

24.-AUTORES: P. Pérez-Tejeda, F. Sánchez, P. López, J. Burgess, E. Carmona, P. Palma y
M. L. Moyá

TITULO: Solvent effects on intervalence electron transfer of mixed-valence compounds
CARÁCTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: XXIIth International Symposium on Bioelectrochemistry and
Bioenergetics
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
FECHA: Septiembre 1994 LUGAR DE CELEBRACION: Sevilla (España)

25.-AUTORES: F. Sanchez, P. Pérez-Tejeda, M. L. Moyá y J. Benko

TITULO: Study of the reaction $\text{Co}(\text{NH}_3)_4(\text{pzCO}_2)^{2+} + \text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$ in binary aqueous
mixtures
CARÁCTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: Yamada Conference XXXXII. Structure, Fluctuations and Relaxation in
Solution
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
FECHA: Diciembre 1994 LUGAR DE CELEBRACION: Nagoya (Japón)

26.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez y M. M. Graciani

TITULO: Estudio de la formación del complejo binuclear $[(\text{en})_2\text{Co}(\mu\text{-pzCO}_2)\text{Fe}(\text{CN})_5]^-$
en disoluciones acuosas salinas y en sistemas de dodecil sulfato sódico
CARÁCTER: Nacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: 2ª Reunión Nacional del Grupo de Coloides e Interfases
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación oral
FECHA: Julio 1996 LUGAR DE CELEBRACION: Sigüenza (España)

27.-AUTORES: P. López, M. L. Moyá, C. Gómez-Herrera y F. Sánchez

TITULO: Bases comunes de los efectos cinéticos de electrolitos, micelas y microemulsiones

CARÁCTER: Nacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: 2ª Reunión Nacional del Grupo de Coloides e Interfases

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación oral

FECHA: Julio 1996

LUGAR DE CELEBRACION: Sigüenza (España)

28.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani, R. Balahura y M. L. Moyá

TITULO: Estudio de los efectos micelares sobre la reacción de transferencia electrónica en el seno del par iónico $[\text{Co}(\text{NH}_3)_5(\text{cianopiperidina})]^{3+}/[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{4-}$

CARÁCTER: Nacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: 2ª Reunión Nacional del Grupo de Coloides e Interfases

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

FECHA: Julio 1996

LUGAR DE CELEBRACION: Sigüenza (España)

29.-AUTORES: F. Sánchez, M. M. Graciani, R. Jiménez, M. L. Moyá, E. Muñoz, A. Rodríguez y M. Galán

TITULO: Medium effects on the electron transfer reaction between cis- $\text{Co}(\text{NH}_3)_4(\text{H}_2\text{O})_2^{3+}$ and the donors $\text{Fe}(\text{CN})_6^{4-}$ and $\text{Mo}(\text{CN})_8^{4-}$

CARÁCTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: FRIS'96

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

FECHA: Septiembre 1996 LUGAR DE CELEBRACION: Graz (Austria)

30.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani, G. Fernández, M. Muñoz y M. L. Moyá

TITULO: Efectos micelares sobre la reacción $\text{Fe}(\text{CN})_4(\text{bpy})^{2-} + \text{S}_2\text{O}_8^{2-}$

CARÁCTER: Nacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: XXVI Reunión Bienal de la R.S.E.Q.

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

FECHA: Septiembre 1997 LUGAR DE CELEBRACION: Cadiz (España)

31.-AUTORES: M. M. Graciani, G. Fernández, A. Rodríguez, M. Muñoz y M. L. Moyá

TITULO: Estudio de la reacción $\text{Fe}(\text{CN})_5(4\text{-CNpy})^{3-} + \text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ en disoluciones salinas acuosas y en sistemas micelares

CARÁCTER: Nacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: 3ª Reunión Nacional del Grupo de Coloides e Interfases

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

FECHA: Junio 1998 LUGAR DE CELEBRACION: Almería (España)

32.-AUTORES: M. Muñoz, A. Rodríguez, M. M. Graciani, G. Fernández y M. L. Moyá

TITULO: Estudio de la reacción $\text{DDT} + \text{OH}^-$ en sistemas micelares catiónicos

CARÁCTER: Nacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: 3ª Reunión Nacional del grupo de Coloides e Interfases

TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación oral

FECHA: Junio 1998 LUGAR DE CELEBRACION: Almería (España)

33.-AUTORES: M. M. Graciani, M. Muñoz, A. Rodríguez, G. Fernández, M. L. Moyá, F. Ortega y M. Vázquez

TITULO: Determinación de parámetros estructurales de disoluciones acuosas micelares de Tritón X-100 y Brij₃₅

CARÁCTER: Nacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: XVI Reunión Nacional de Espectroscopía

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

FECHA: Septiembre 1998 LUGAR DE CELEBRACION: Sevilla (España)

34.-AUTORES: M. L. Moyá, M. M. Graciani, G. Fernández, A. Rodríguez y M. Muñoz

TITULO: Premicellar and micellar kinetic effects in ligand substitution reactions

CARÁCTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: FRIS'99

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

FECHA: Septiembre 1999 LUGAR DE CELEBRACION: Lisboa (Portugal)

- 35.-AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, M. Muñoz, G. Fernández y M. L. Moyá
TITULO: Study of the reaction $\text{Fe}(\text{CN})_5\text{H}_2\text{O}^{3-}$ + pyrazine in micellar solutions
CARÁCTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: FRIS'99
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
FECHA: Septiembre 1999 LUGAR DE CELEBRACION: Lisboa (Portugal)
- 36.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez, M. M. Graciani, G. Fernández y M. Muñoz
TITULO: Estudio de la reacción $\text{DDT} + \text{OH}^-$ en sistemas micelares zwitteriónicos
CARÁCTER: Nacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: 4ª Reunión Nacional del Grupo de Coloides e Interfases
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación oral
FECHA: Julio 2000 LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (España)
- 37.-AUTORES: A. Rodríguez, M. Muñoz, M. M. Graciani, G. Fernández y M. L. Moyá
TITULO: Estudio de la reacción $\text{DDT} + \text{OH}^-$ en sistemas micelares no iónicos
CARÁCTER: Nacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: 4ª Reunión Nacional del Grupo de Coloides e Interfases
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
FECHA: Julio 2000 LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (España)
- 38.-AUTORES: M. M. Graciani, G. Fernández, A. Rodríguez, M. Muñoz y M. L. Moyá
TITULO: Influence of changes in the interfacial electrical potential on a ligand substitution reaction in aqueous sodium dodecyl sulfate micellar solutions
CARÁCTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: FRIS'01
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
FECHA: Julio 2001 LUGAR DE CELEBRACION: Versalles (Francia)
- 39.-AUTORES: A. Rodríguez, M. Muñoz, M. M. Graciani, G. Fernández and M.L. Moyá
TITULO: Study of the reaction 1-Methoxy-4-(Methylthio)benzene + IO_4^- : Importance

of micellar medium effects.

CARÁCTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: 14th SIS . Surfactants in Solution Symposium
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
FECHA:Junio 2002 LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (España)

40.-AUTORES: A. Rodríguez, M. Muñoz, M. M. Graciani and M.L. Moyá

TITULO: Influence of the nature of the cation on the reaction $\text{DDT} + \text{OH}^-$ in sulfobetaine micellar solutions in the presence of added salts.

CARÁCTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: 14th SIS . Surfactants in Solution Symposium
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
FECHA:Junio 2002 LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (España)

41.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani, M. Muñoz and M.L. Moyá

TITULO: Study of the reaction 2-(p-nitrophenyl)ethyl bromide + OH^- in sulfobetaine aqueous micellar solutions in the presence and absence of added salts.

CARÁCTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: 14th SIS . Surfactants in Solution Symposium
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
FECHA:Junio 2002 LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona (España)

42.- AUTORES: G. Fernández, A. Rodríguez, M. M. Graciani, M. Muñoz y M. L. Moyá

TITULO: Estudio de la reacción metil 4-nitrobencenosulfonato + Cl^- en disoluciones micelares mixtas de cloruro de hexadeciltrimetilamonio y Triton X-100

CARÁCTER: Nacional
CONGRESO: XXIX Reunión Bienal de la R.S.E.Q.
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster
FECHA: Julio 2003 LUGAR DE CELEBRACION: Madrid (España)

43.- AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, M. Muñoz y M. L. Moyá

TITULO: The reaction methyl 4-nitrobenzenesulfonate + Br^- in cationic and

zwitterionic micellar solutions

CARACTER: Internacional

CONGRESO: 17th ECIS

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Septiembre 2003 LUGAR DE CELEBRACION:Florenca (Italia)

44.- AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez, M. Muñoz y M. M. Graciani

TITULO: Kinetic micellar effects in tetradecyltrimethylammonium bromide-pentanol micellar solutions

CARACTER: Internacional

CONGRESO: 17th ECIS

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Septiembre 2003 LUGAR DE CELEBRACION:Florenca (Italia)

45.- AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez, M. Muñoz y M. M. Graciani

TITULO: Kinetic studies in mixed SDS-Tween 20 and SDS-SB3-14 micellar solutions

CARACTER: Internacional

CONGRESO: 18th ECIS

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Septiembre 2004 LUGAR DE CELEBRACION: Almería (España)

46.- AUTORES: M. Muñoz, A. Rodríguez, M. M. Graciani, M. L. Moyá

TITULO: Water-ethylene glycol alkyltrimethylammonium bromide micellar solutions as reaction media

CARACTER: Internacional

CONGRESO:18th ECIS

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Septiembre 2004 LUGAR DE CELEBRACION: Almería (España)

47.- AUTORES: M. L. Moyá, M. . M. Graciani, M. Muñoz, A. Rodríguez y G. Fernández

TITULO: Estudio de la reacción 4-nitrobenzenosulfonato de metilo y bromuro en

disoluciones micelares de bromuros de alquiltrimetilamonio en aguaetilenglicol

CARACTER: Nacional

CONGRESO: 6ª Reunión Nacional del Grupo de Coloides e Interfases

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Oral

FECHA: Julio 2005

LUGAR DE CELEBRACION: Salamanca (España)

48.- AUTORES: A.. Rodríguez, M. Muñoz, M. M. Graciani, M. L. Moyá

TITULO: Estudios cinéticos en disoluciones micelares aniónicas, catiónicas, no iónicas y zwitteriónicas en mezclas agua-etilenglicol

CARACTER: Nacional

CONGRESO: 6ª Reunión Nacional del Grupo de Coloides e Interfases

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Julio 2005

LUGAR DE CELEBRACION: Salamanca (España)

49.- AUTORES: M. L. Moyá, M. . M. Graciani, M. Muñoz, A. Rodríguez

TITULO: Water-N,N-dimethylformamide alkyltrimethylammonium bromide micellar solutions :thermodynamimic, structural and kinetic studies

CARACTER: Internacional

CONGRESO: 19th ECIS

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Septiembre 2005

LUGAR DE CELEBRACION: Geilo (Noruega)

50.-AUTORES: M. L. Moyá, M. M. Graciani, A. Rodríguez, M. Muñoz y G. Fernández

TITULO: Equilibrium binding constants to micellar aggregates

CARACTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: XVII Italian-Spanish Congress on the Thermodynamims of Meta Complexes

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Septiembre 2006

LUGAR DE CELEBRACION: Sevilla (España)

51.-AUTORES: M. L. Moyá,A. Rodríguez, M. M. Graciani y M. Muñoz

TITULO: Effects of ethylene glycol addition in the sphere-to.rod transition in gemini surfactants micellar solutions

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: 20th ECIS
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster
FECHA: Septiembre 2006 LUGAR DE CELEBRACION: Budapest (Hungria)

52.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani, M. Muñoz y M. L. Moyá

TITULO: Micellar solutions of sulfobetaine surfactants in water-ethylene glycol mixtures
CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: 20th ECIS
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster
FECHA: Septiembre 2006 LUGAR DE CELEBRACION: Budapest (Hungria)

53.-AUTORES: M. M. Graciani, M. L. Moyá, A. Rodríguez y G. Fernández

TITULO: Effects of Head group size on micellization of cetyltrialkylammonium bromide surfactants in water-ethylene glycol mixtures
CARACTER: Nacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: VIII GECI y 2º RIC I
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster
FECHA: Julio 2007 LUGAR DE CELEBRACION: Coimbra (Portugal)

54.-AUTORES: M. M. Graciani, M. L. Moyá, A. Rodríguez y G. Fernández

TITULO: Effects of Head group size on micellization of cetyltrialkylammonium bromide surfactants in water-ethylene glycol mixtures
CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: ECIS07
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster
FECHA: Septiembre 2007 LUGAR DE CELEBRACION: Ginebra (Suiza)

55.-AUTORES: M. M. Graciani, M. L. Moyá, A. Rodríguez y G. Fernández

TITULO: Effects of Head group size on micellization of cetyltrialkylammonium bromide surfactants in water-ethylene glycol mixtures
CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: ECIS07

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Septiembre 2007

LUGAR DE CELEBRACION: Ginebra (Suiza)

56.-AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, G. Fernández y M. L. Moyá

TITULO: Effects of head group size on micellization of cetyltrialkylammonium bromide surfactants in water-ethylene glycol mixtures.

CARACTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: 19th ICPOC

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Julio 2008

LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela
(España)

57.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez, M. M. Graciani y G. Fernández

TITULO: Kinetic studies as a tool in the investigation of micellar solutions

CARACTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: 19th ICPOC

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral

FECHA: Julio 2008

LUGAR DE CELEBRACION: Santiago de Compostela
(España)

58.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez, M. M. Graciani y G. Fernández

TITULO: Solvophobic effects on the micellar growth of cationic dimeric surfactants.

CARACTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: ECIS'08

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Septiembre 2008

LUGAR DE CELEBRACION: Cracovia (Polonia)

59.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani y M. L. Moyá

TITULO: Mixtures of monomeric and dimeric surfactants: Hydrophobic chain length and spacer group length effects on nonideality

CARACTER: Internacional

PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: ECIS'08

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Septiembre 2008 LUGAR DE CELEBRACION: Cracovia (Polonia)

60.-AUTORES: Victoria I. Martín, A. Rodríguez, M. M. Graciani, M. L. Moyá

TITULO: Effects of 1,2 and 1,3-propylene glycol addition on the micellization of tetradecyltrimethylammonium bromide

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: ISMEC2009

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Junio 2009 LUGAR DE CELEBRACION: Pisa (Italia)

61.-AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez y M. L. Moyá

TITULO: Waterethylene glycol cationic dimeric micelle solutions. Aggregation, micelle growth and characteristics as microreactors

CARACTER: Ibérica PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: RICI III

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Julio 2009 LUGAR DE CELEBRACION: Granada (España)

62.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez, M. M. Graciani y G. Fernández

TITULO: The solvophobic effect on micellization

CARACTER: Ibérica PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: RICI III

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral

FECHA: Julio 2009 LUGAR DE CELEBRACION: Granada (España)

62.-AUTORES: M. M. Graciano, A. Rodríguez y M. L. Moyá

TITULO: Study of the reaction methyl 4-nitrobenzenesulfonate + bromide ions in mixed micelle solutions: Kinetic evidence for morphological transitions

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: ECIS2009

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Septiembre 2009 LUGAR DE CELEBRACION: Antalia (Turquía)

63.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez, M. M. Graciani y G. Fernández

TITULO: Effects of addition of polar organic solvents on micellization

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: ECIS2009

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Septiembre 2009 LUGAR DE CELEBRACION: Antalia (Turquía)

64.-AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, V. I. Martín y M. L. Moyá

TITULO: Micellization and micellar growth of alkanedyil- α - ω -bis(dimethyldidodecylammonium) bromide surfactants in the presence of medium chain alcohols.

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: ACS. Symposium in honor of Clifford Bunton

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral

FECHA: Marzo 2010 LUGAR DE CELEBRACION: San Francisco (USA)

65.-AUTORES: V. I. Martín, M. M. Graciani, A. Rodríguez, G. Fernández y M. L. Moyá

TITULO: Micellization and micellar growth in pure alkanedyil- α - ω -bis(dimethyldidodecylammonium) bromide surfactants in the presence of medium chain linear alcohols

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: ISMEC 2010

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Junio 2010 LUGAR DE CELEBRACION: Bilbao (España)

66.-AUTORES: M. L. Moyá, V. I. Martín, A. Rodríguez, M. M. Graciani y G. Fernández

TITULO: Influence of MEGA10 addition on the micellar growth of alkanedyil- α - ω -bis(dimethyldidodecylammonium) bromide micelles

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: ECIS2010

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Septiembre 2010 LUGAR DE CELEBRACION: Praga (República Checa)

67.-AUTORES: A. Rodríguez, M. M. Graciani, V. I. Martín y M. L. Moyá

TITULO: Mixed MEGA10-12-s-12,2Br⁻ micellar systems

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: ECIS2010

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Septiembre 2010 LUGAR DE CELEBRACION: Praga (República Checa)

68.-AUTORES: M. L. Moyá, A. Rodríguez, M. M. Graciani V. I. Martín

TITULO: Concentration and medium micellar kinetic effects caused by morphological transitions

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: RICI4

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Oral

FECHA: Julio 2011 LUGAR DE CELEBRACION: Oporto (Portugal)

69.-AUTORES: V. I. Martín A. Rodríguez, M. M. Graciani y M. L. Moyá

TITULO: Synthesis and physicochemical characterization of bromide surfactants with phenyl and cyclohexyl rings in the head group

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: RICI4

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Oral

FECHA: Julio 2011 LUGAR DE CELEBRACION: Oporto (Portugal)

70.-AUTORES: M. M. Graciani, A. Rodríguez, V. I. Martín y M. L. Moyá

TITULO: Kinetic effects of organic solvent addition in micellar solutions

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: RICI4

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Julio 2011 LUGAR DE CELEBRACION: Oporto (Portugal)

71.-AUTORES: M. L. Moyá, V. I. Martín, A. Rodríguez y M. M. Graciani

TITULO: Synthesis and physicochemical characterization of dimeric bromide surfactants
with phenyl and cyclohexyl rings in the head group

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: ECIS2011

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Oral

FECHA: Septiembre 2011 LUGAR DE CELEBRACION: Berlín (Alemania)

72.-AUTORES: A. Rodríguez, R. Domínguez, M. M. Graciani y M. L. Moyá

TITULO: Syntheses and characterization of 12-s-12,2Br⁻ (s=7,9,11) dimeric surfactants

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: ECIS2011

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Septiembre 2011 LUGAR DE CELEBRACION: Berlín (Alemania)

73.-AUTORES: V. I. Martín, A. Rodríguez, M. M. Graciani y M. L. Moyá

TITULO: Syntheses of a novel surfactant derived from lysine

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: ANQUE 2012

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Junio 2012 LUGAR DE CELEBRACION: Sevilla (España)

74.-AUTORES: V. I. Martín, A. Rodríguez, M. M. Graciani y M. L. Moyá

TITULO: Antimicrobial activity of novel surfactants with phenyl and cyclohexyl rings in
the head groups

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso

CONGRESO: ANQUE 2012

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

FECHA: Junio 2012 LUGAR DE CELEBRACION: Sevilla (España)

- 75.-AUTORES: G. Fernández Catá, C. Searlez, V. I. Martín, M. L. Moyá y L. J. Álvarez
 TITULO: Estructuras micelares de surfactants via dinámica molecular
 CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
 CONGRESO: IV Congreso de Físicoquímica Teórica y Computacional
 TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
 FECHA: Noviembre 2012 LUGAR DE CELEBRACION: Altos de Pipe (Venezuela)
- 76.-AUTORES: M. L. Moyá, Victoria I. Martín y Amalia Rodríguez
 TITULO: Novel surfactants with phenyl and cyclohexyl rings in the head group
 CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
 CONGRESO: CLAFQO 2013
 TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
 FECHA: Abril 2013 LUGAR DE CELEBRACION: Foz do Iguazú (Brasil)
- 77.-AUTORES: María Luisa Moyá, Victoria Isabel Martín, Alfredo Maestre y Amalia Rodríguez
 TITULO: Binding of cationic single-chain/dimeric surfactants to bovine serum albumin
 CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
 CONGRESO: RICI5
 TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
 FECHA: Junio 2013 LUGAR DE CELEBRACION: San Sebastián (España)
- 78.-AUTORES: Victoria Isabel Martín, Luis Javier Alvarez y María Luisa Moyá
 TITULO: Molecular dynamics simulations of surfactant micelles
 CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
 CONGRESO: RICI5
 TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster
 FECHA: Junio 2013 LUGAR DE CELEBRACION: San Sebastián (España)
- 79.-AUTORES: Victoria Isabel Martín, Amalia Rodríguez, Alfredo Maestre y María Luisa Moyá
 TITULO: Synthesis and physicochemical characterization of alkanedyl-

bis(dimethyldodecylammonium) bromide, 12-s-12,2Br⁻, surfactants with s=7, 9, 11 in aqueous medium

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: RICI5
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster
FECHA: Junio 2013 LUGAR DE CELEBRACION: San Sebastián (España)

80.-AUTORES: Victoria Isabel Martín, Amalia Rodríguez y María Luisa Moyá

TITULO: Study of S_N2 substitutions reactions in dodecyldibromide dimeric micellar solutions in the absence and in the presence of alcohols

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: ICCK2013
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster
FECHA: Julio 2013 LUGAR DE CELEBRACION: Sevilla (España)

81.-AUTORES: Pilar López, J. P. García, E. Marrón, V. I. Martín y M. L. Moyá

TITULO: Role of the spacer in the interaction of 12-s-12 gemini surfactants (s=2, 10) to the DNA

CARACTER: Internacional PUBLICACION: Actas del Congreso
CONGRESO: ICCK2013
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster
FECHA: Julio 2013 LUGAR DE CELEBRACION: Sevilla (España)

Tesis Doctorales dirigidas

TITULO: Estudio de la Reactividad Química en Sistemas Micelares Inversos

DOCTORANDO: Pilar López Cornejo

CENTRO: Departamento de Química Física UNIVERSIDAD: Sevilla

FECHA: Julio 1994 CALIFICACION: Apto cum laude

TITULO: Estudio de Reacciones de Deshidrocloración de Pesticidas con Hidróxido Sódico
en Sistemas Micelares

DOCTORANDO: María Muñoz Pérez

CENTRO: Departamento de Química Física UNIVERSIDAD: Sevilla

FECHA: Octubre 1999 CALIFICACION: Sobresaliente cum laude

TITULO: Estudio de Reacciones Químicas con Participación de Complejos
Pentacianoferratos(II) en Disoluciones Acuosas y en Sistemas Micelares
Directos

DOCTORANDO: Gaspar Fernández García

CENTRO: Departamento de Química Física UNIVERSIDAD: Sevilla

FECHA: Enero 2001 CALIFICACION: Sobresaliente cum laude

TITULO: Preparación y estudio de tensioactivos mono- y multicatenarios derivados de
materias primas renovables

DOCTORANDO: Victoria Isabel Martín Herrera

CENTRO: Departamento de Química Física UNIVERSIDAD: Sevilla

FECHA: En curso CALIFICACION:

Participación en comités y representaciones internacionales

Título del Comité:

Entidad de la que depende:

Tema:

Fecha:

Título del Comité:

Entidad de la que depende:

Tema:

Fecha:

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Experiencia en organización de actividades de I+D

Organización de congresos, seminarios, jornadas, etc., científicos-tecnológicos

Título: 1ª Reunión Ibérica de Coloides e Interfases

Tipo de actividad: Miembro del Comité Ambito: Ibérico
Científico

Fecha: Julio 2005

Título: 4ª Reunión Ibérica de Coloides e Interfases

Tipo de actividad: Miembro del Comité Ambito: Internacional
Científico

Fecha: Julio 2011

Título: 5ª Reunión Ibérica de Coloides e Interfases

Tipo de actividad: Miembro del Comité Ambito: Internacional
Científico

Fecha: Junio 2013

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Experiencia de gestión de I+D
Gestión de programas, planes y acciones de I+D

Título: Plan Nacional I+D+I

Tipo de actividad: Evaluador en el área de Química Física

Fecha: Mayo 2008

Título: ANEP

Tipo de actividad: Evaluador de proyectos de investigación en el área de Ciencias y Tecnología Químicas

Fecha: Desde 1997 hasta la actualidad

Título: Programa de la Promoción General de la Investigación del Plan Gallego de Investigación, Desarrollo e Investigación Tecnológica

Tipo de actividad: Evaluador de proyectos de investigación en el área de Ciencias y Tecnología Químicas

Fecha: Desde 2007 hasta la actualidad

Título: Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica de Argentina

Tipo de actividad: Evaluador de proyectos de investigación en el área de Ciencias y Tecnología Químicas

Fecha: 2003, 2004, 2006.

Tipo de actividad: Vicepresidenta del grupo Especializado de Coloides e Interfases de la RSEQ

Fecha: 2010-2011

Tipo de actividad: Vocal del grupo Especializado de Coloides e Interfases de la RSEQ

Fecha: 2011- hasta la actualidad

Tipo de actividad: Vocal de la Real Sociedad Española de Química, Sección de Andalucía Occidental

Fecha: Febrero 2013

Otros méritos o aclaraciones que se desee hacer constar

Tesis de Licenciatura Dirigidas

TITULO: Efectos Salinos y del Medio en Procesos de Sustitución de Ligandos

AUTOR: Antonio Barrio González

CENTRO: Departamento de Química Física UNIVERSIDAD: Sevilla

FECHA: Diciembre 1988 CALIFICACION: Sobresaliente

TITULO: Las Microemulsiones como Medio en Cinética Química: Reacción Yoduro
Persulfato

AUTOR: Santiago Fuentes Vázquez

CENTRO: Departamento de Química Física UNIVERSIDAD: Salamanca

FECHA: Octubre 1990 CALIFICACION: Sobresaliente

TITULO: Efectos Salinos en la Formación del Complejo Binuclear $[(\text{NH}_3)_4(\mu\text{-pzCO}_2)\text{Fe}(\text{CN})_5]\text{-}$

AUTOR: Elena Fernández Boy

CENTRO: Departamento de Química Física UNIVERSIDAD: Sevilla

FECHA: Junio 1991 CALIFICACION: Sobresaliente

TITULO: Efecto Salino en la Cinética de Oxidación del Ioduro con Hexacloroiridato(VI)

AUTOR: María Bejarano Bravo

CENTRO: Departamento de Química Física UNIVERSIDAD: Sevilla

FECHA: Julio 1991 CALIFICACION: Sobresaliente

Méritos de Investigación

Por Resolución de la Comisión Nacional Evaluadora de la Actividad Investigadora tengo concedidos cuatro Tramos de Investigación (Sexenios) de Nivel 27.

Por Resolución de la Comisión Andaluza de Evaluación de Complementos Autonómicos tengo reconocidos cinco tramos.

Premios, becas y ayudas recibidos

Premio Sevillana de Electricidad 1984-85

Beca F.P.I. Enero 1986

Ayuda de 96000 pts para realizar una estancia en la Universidad de Salamanca concedida por la Consejería de Educación y Ciencia de la Junta de Andalucía en la convocatoria para la adjudicación de ayudas para la Investigación, Orden de 1 de Abril de 1989.

Ayuda de 40000 pts para asistir a un congreso en Salamanca concedida por la Consejería de Educación y Ciencia de la Junta de Andalucía en la convocatoria de ayudas a la Investigación, Orden de 12 de Febrero de 1990.

Ayuda de 90000 pts para asistir a un congreso en Versalles (Francia) concedida por la Consejería de Educación y Ciencia de la Junta de Andalucía en la convocatoria de ayudas a la Investigación, Orden de 19 de Agosto de 2001.

Adjudicación de una beca F.P.I. al proyecto PB95-0527, del que fui investigadora principal, por el Ministerio de Educación y Ciencia según Resolución de 28 de Octubre de 1996.

Adjudicación de una beca F.P.I. al proyecto CTQ2009-07478, del que fui investigadora principal, por el Ministerio de Educación y Ciencia.

He sido invitada a impartir dos conferencias sobre por la Real Academia de Ciencias de Sevilla:

1.- "Reacciones de Transferencia Electronica: Tratamiento de Marcus y Desarrollos posteriores"

FECHA: 26/02/1993

2.- "Disoluciones de tensioactivos diméricos. Efectos de aditivos"

FECHA: 23/05/2011

Miembro de la Real Sociedad Española de Química

Miembro de la American Chemical Society

Soy censora de revistas científicas como Langmuir, Soft Matter, International Journal of Chemical Kinetics, Journal of Colloid and Interface Science, Polymer Science, Physical Chemistry Chemical Physics, J. Phys. Org. Chem., Journal of Dispersion and Technology, J. Phys. Chem. B, etc.



Comisión Interministerial de Ciencia y Tecnología

Curriculum Vitae

Número de páginas que contiene: **49**

Nombre y apellidos: **Enrique Ortí Guillén**

Fecha: **12 de Febrero de 2014**

Firma:

Una firma manuscrita en azul, que parece ser "Enrique Ortí Guillén", escrita sobre una línea horizontal.

El arriba firmante declara que son ciertos los datos que figuran en este currículum, asumiendo en caso contrario las responsabilidades que pudieran derivarse de las inexactitudes que consten en el mismo.

Apellidos: **Ortí Guillén**

Nombre: **Enrique**

Nacionalidad: **Española**

DNI:

Fecha de nacimiento:

Nº Funcionario (NRP):

Dirección Particular:

Ciudad:

Código Postal:

Teléfono:

Situación profesional actual

Organismo: **Universitat de València**

Facultad, Escuela o Instituto: **Facultad de Química**

Depto./Secc./Unidad estr.: **Departamento de Química Física / Instituto de Ciencia Molecular (ICMol)**

Dirección postal: **C/ Catedrático José Beltrán 2, 46980 Paterna (Valencia)**

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): **963544438**

Fax: **963543274**

Correo electrónico: **Enrique.Orti@uv.es**

Especialización (Códigos UNESCO): **221023**

Categoría profesional: **Catedrático de Universidad**

Fecha de inicio: **8 de Julio de 2008**

Situación administrativa

Plantilla

Contratado

Interino

Becario

Otras situaciones especificar:

Dedicación

A tiempo completo

A tiempo parcial

Tramos de investigación que tiene acreditados: **5** (1982/1987; 1988/1993; 1994/1999; 2000/2005; 2006-2011)

Tramos de docencia que tiene acreditados: **6** (1982/1986; 1987/1991; 1992/1996; 1997/2001; 2002/2006; 2007-2011)

Índice h: **38** (Citas promedio por artículo: 22,65)

(Clave para la búsqueda: - Author: "ORTI E NOT CANELLES P* NOT PRIETO V* NOT HUGUET JM*")

- Address: "UNIV VALENCIA OR NOTRE DAME OR UNIV MONS")

Líneas de investigación

Breve descripción, por medio de palabras claves, de la especialización y líneas de investigación actuales.

Caracterización Teórica (cálculos químico-cuánticos) de Sistemas Moleculares Electroactivos para Electrónica Molecular:

Oligómeros conjugados: oligotiofenos, oligoparafenilenos, oligopirroles....

Aceptores y dadores electrónicos π -conjugados: tetraciano-*p*-quinodimetanos y tetratiafulvalenos.

Sistemas supramoleculares: Sistemas dador-aceptor, fullerenos, polímeros supramoleculares.

Complejos de metales de transición: Complejos electrofosforescentes de Ru(II) e Ir(III).

Palabras Clave: Estructura molecular. Estructura electrónica. Estados excitados. Estados de oxidación.

Formación Académica

Titulación Superior	Centro	Fecha
Licenciado en Ciencias Químicas	Universitat de València	1974-1979
Grado de Licenciatura	Universitat de València	17-Sept.-1982

Doctorado

Centro

Fecha

Doctor en Ciències Químiques	Universitat de València	11-October-1985
------------------------------	-------------------------	-----------------

Actividades anteriores de carácter científico profesional

Puesto	Institución	Fechas
Becario del plan F.P.I (MEC)	Universitat de València	Enero-82/Dic.-85
Prof. Ayudante	Colegio Univ. de Castellón (Univ. de València)	Feb.-86/Sept.-87
Ayudante L.R.U.	Universitat de València	Oct.-86/Marzo-87
Becario Postdoctoral (Gen. Val.)	Université de Namur (Bélgica)	Enero-87/Dic.-87
Profesor Invitado	FNRS – Université Mons-Hainaut (Bélgica)	Mayo-98/Julio-98
Prof. Titular de Universidad	Universitat de València	Marzo-87/Julio-08

Idiomas (R = regular, B = bien, C = correctamente)

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Francés	C	C	C
Inglés	C	C	C
Valenciano	C	C	C

Participación en Proyectos de I+D financiados en Convocatorias públicas.

Título del proyecto: *Estudio Teórico Sistemático sobre la Naturaleza del Enlace Metal-Ligando. Aplicación a Complejos de Interés Catalítico y Bioquímico.*

Entidad financiadora: CAICYT (714/84)

Entidades participantes: Universitat de València

Duración, desde: 1986 hasta: 1988 Cuantía de la subvención:

Investigador responsable: Dr. F. Tomás Vert

Número de investigadores participantes: 8

Título del proyecto: *Caracterización de la Estructura Electrónica de Materiales Orgánicos Conductores de la Electricidad.*

Entidad financiadora: Universitat de València (421/89)

Entidades participantes: Universitat de València

Duración, desde: Abril 1989 hasta: Abril 1990 Cuantía de la subvención: 650.000 pts

Investigador responsable: Dr. E. Ortí Guillén

Número de investigadores participantes: 2

Título del proyecto: *Estudio Teórico de Nuevos Materiales Orgánicos Conductores de la Electricidad: Desarrollo Metodológico y Determinación de la Estructura Electrónica.*

Entidad financiadora: DGICYT (PS88-0112)

Entidades participantes: Universitat de València

Duración, desde: Julio 1989 hasta: Julio 1992 Cuantía de la subvención: 3.375.000 pts

Investigador responsable: Dr. I. Nebot Gil

Número de investigadores participantes: 9

Título del proyecto: *Caracterización y Desarrollo Teórico de Nuevos Materiales Moleculares Electrónica y Optoelectrónicamente activos: Sistemas Macrocíclicos y Poliacénicos.*

Entidad financiadora: DGICYT (PB91-035)

Entidades participantes: Universitat de València

Duración, desde: Nov. 1992 hasta: Nov. 1995 Cuantía de la subvención: 7.000.000 pts

Investigador responsable: Dr. E. Ortí Guillén

Número de investigadores participantes: 5

Título del proyecto: *Elaboración de una Estrategia Teórico-Experimental para el Diseño de Nuevos Complejos Orgánicos de Transferencia de Carga Conductores de la Electricidad.*

Entidad financiadora: CICYT (MAT95-1630-E, Acción Especial)

Entidades participantes: Universitat de València

Duración, desde: Sept. 1995 hasta: Sept. 1996 Cuantía de la subvención: 2.550.000 pts

Investigador responsable: Dr. E. Ortí Guillén

Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: *Sistemas Moleculares Electroactivos: Compuestos Orgánicos con Transferencia de Carga Fotoinducida. Determinación Teórica de la Estructura Molecular y Electrónica.*

Entidad financiadora: CICYT (PB95-0428-C02, Proyecto Coordinado)

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid (UCM) y Universitat de València (UVEG)

Duración, desde: Nov. 1996 hasta: Oct.. 1999 Cuantía de la subv.: UVEG: 5.100.000 pts

Investigador responsable: UCM: Dr. C. Seoane Prado; UVEG: Dr. E. Ortí Guillén
Número de investigadores participantes: UCM: 7; UVEG: 3

Título del proyecto: *Quantum Chemistry of the Excited State.*
Entidad financiadora: Comisión Europea, Programa TMR (ERB FMRX-CT96-0079)
Entidades participantes: Univ. de València junto con otras 6 Univ de Suecia, Francia, Bélgica, Alemania y Gran Bretaña
Duración, desde: Julio 1996 hasta: Mayo 2000 Cuantía de la subvención: UVEG: 28.202.000 pts
Coordinador de la red: Dr. B.O. Roos (Suecia) Coordinador local UVEG: Dra. M. Merchán Bonete
Número de investigadores participantes: UVEG: 8

Título del proyecto: *Utilización de la Química de Coordinación para la Preparación de Materiales de Interés Tecnológico: Polímeros Conductores Orgánicos/Inorgánicos para Electrodo de Baterías y Dispositivos Electrocrómicos.*
Entidad financiadora: DGESIC, Programa Fondos FEDER (1FD97-1765-C03-01)
Entidades participantes: Universitat de València, Universidad de Castellón y Universidad de Málaga
Duración, desde: Enero 2000 hasta: Dic. 2001 Cuantía de la subvención: UVEG: 24.000.000 pts
Investigador responsable: Dr. E. Coronado Miralles
Número de investigadores participantes: UVEG: 8

Título del proyecto: *Caracterización Teórica de Materiales Moleculares.*
Entidad financiadora: Generalitat Valenciana, Programa de Ayuda a Grupos de Investigación (GR01-145)
Entidades participantes: Universitat de València
Duración, desde: Enero 2001 hasta: Nov. 2001 Cuantía de la subvención: 850.000 pts
Investigador responsable: Dr. E. Ortí Guillén
Número de investigadores participantes: 6

Título del proyecto: *Caracterización Teórica de Materiales Moleculares Electroactivos: Oligotiofenos y Tetratíafulvalenos.*
Entidad financiadora: DGESIC (PB98-1447)
Entidades participantes: Universitat de València
Duración, desde: Dic 1999 hasta: Dic 2002 Cuantía de la subvención: 6.000.000 pts
Investigador responsable: Dr. E. Ortí Guillén
Número de investigadores participantes: 5

Título del proyecto: *Sistemas Moleculares Electroactivos*
Entidad financiadora: MCyT (BQU2002-10656-E)
Entidades participantes: Universitat de València
Duración, desde: Mayo 2003 hasta: Mayo 2004 Cuantía de la subvención: 6.000 euros
Investigador responsable: Dr. E. Ortí Guillén
Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: *Sistemas Moleculares Electroactivos: Caracterización Teórica de Oligotiofenos y Tetratíafulvalenos.*
Entidad financiadora: MCyT (BQU2003-05111)
Entidades participantes: Universitat de València
Duración, desde: Nov. 2003 hasta: Nov. 2006 Cuantía de la subvención: 73.300,00 euros

Coordinador del proyecto: Dr. David Mecerreyes (CIDETEC, San Sebastián)
Investigador principal: Dr. Henk J. Bolink (por la Univ. Valencia)

Título del proyecto: *Moléculas Policonjugadas para Electrónica y Fotónica Molecular: Estudio Químico-Cuántico de las Relaciones Estructura-Propiedad.*

Entidad financiadora: Generalitat Valenciana (ACOMP/2009/269)
Entidades participantes: Universitat de València
Duración, desde: Enero 2009 hasta: Dic. 2009 Cuantía de la subvención: 7.700,00 euros
Investigador responsable: Dr. E. Ortí Guillén
Número de investigadores participantes: 7

Título del proyecto: *Cost-Efficient Lighting Devices Based on Liquid Processes and Ionic Organometallic Complexes (CELLO) ICT-2009.3.3*

Entidad financiadora: Unión Europea, 7º Programa Marco (ICT: Information and Communications Technologies) (ref.: FP7-248043)
Entidades participantes: 4 Universidades/Centros de Investigación (entre ellos el ICMol-Univ. Valencia) y 3 empresas (Siemens, Osram, VTT).
Duración, desde: 1 Enero 2010 hasta: 31 Diciembre 2012 Cuantía de la subvención: 872.400,00 euros

Coordinador del proyecto: Dr. Henk J. Bolink (Univ. Valencia)

Título del proyecto: *Estudio Teórico de Sistemas Electroactivos para Electrónica Molecular*

Entidad financiadora: MICINN (CTQ2009-08790)
Entidades participantes: Universitat de València
Duración, desde: 1 Enero 2010 hasta: 31 Diciembre 2012 Cuantía de la subvención: 84.200,00 euros
Investigador responsable: Dr. E. Ortí Guillén
Número de investigadores participantes: 7

Título del proyecto: *Hybrid Molecule-Nanocrystal Assemblies for Photonic and Electronic Sensing Applications (HYSENS) NMP3-SL-2011-263091*

Entidad financiadora: Unión Europea, 7º Programa Marco (NMP: Nanosciences, Nanotechnologies, Materials and new Production Technologies) (ref.: FP7-263091)
Entidades participantes: 6 Universidades/Centros de Investigación (entre ellos el ICMol-Univ. Valencia) y 3 empresas (Scriba Nanotechnologies, Cellix Limited, Mildendo).
Duración, desde: 1 Abril 2011 hasta: 31 Marzo 2014 Cuantía de la subvención: 258.527,60 euros

Coordinador del proyecto: Dr. Henk J. Bolink (Univ. Valencia)

Título del proyecto: *Dispositivos Moleculares Emisores de Luz y Fotovoltaicos.*

Entidad financiadora: Generalitat Valenciana (PROMETEO/2012/053)
Entidades participantes: Universitat de València
Duración, desde: Junio 2012 hasta: Dic. 2015 Cuantía de subvención: 53.335 euros (2012)
Investigador responsable: Dr. E. Ortí Guillén
Número de investigadores participantes: 12

Título del proyecto: *Estudio Teórico de Sistemas Electroactivos/Fotoactivos para Electrónica Molecular*
Entidad financiadora: MINECO (CTQ2012-31914)
Entidades participantes: Universitat de València
Duración, desde: 1 Enero 2013 hasta: 31 Diciembre 2015 Cuantía de la subvención: 89.000,00 euros
Investigador responsable: Dr. E. Ortí Guillén
Número de investigadores participantes: 7

Publicaciones (Lista completa)

(CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = "review", E = editor,
S = Documento Científico-Técnico restringido.)

1. E. Ortí, F. Tomás, J. Sánchez-Marín
"Theoretical Studies on Conformational Isomerism of Bifurans and Bipyrrroles"
J. Mol. Struct., Theochem **1983**, 104, 197-206. CLAVE: A
 2. E. Ortí, J. Sánchez-Marín, F. Tomás
"Ab Initio Internal Rotation Barriers of Bifurans"
J. Mol. Struct., Theochem **1984**, 108, 199-210. CLAVE: A
 3. J. Sánchez-Marín, E. Ortí, J.M. Aulló, F. Tomás
"Molecular Associations between Lumiflavin and Some β -Carbolines"
J. Mol. Struct., Theochem **1985**, 120, 21-27. CLAVE: A
 4. E. Ortí, J. Sánchez-Marín, J. Planelles, F. Tomás
"Conformational Behaviour of 1H-pyrrole,2-(2-Furanyl) and Structural Isomers"
J. Mol. Struct., Theochem **1985**, 120, 29-33. CLAVE: A
 5. J. Sánchez-Marín, E. Ortí, F. Tomás
"Study of a Medium-Size Molecular Biological Association by Means of a Pair Potential Semiempirical Approach: β -Carboline-Lumiflavin"
J. Comput. Chem. **1985**, 6, 441-446. CLAVE: A
 6. E. Ortí, J. Sánchez-Marín, F. Tomás
"Ab Initio Study of Rotational Isomerism and Electronic Structure of Isomeric Bipyrrroles"
J. Mol. Struct., Theochem **1985**, 124, 307-317. CLAVE: A
 7. E. Ortí, J. Sánchez-Marín, F. Tomás
"Conformational Behaviour of 2,2'-Bipyrrrole. An Ab Initio Approach"
Theor. Chim. Acta **1986**, 69, 41-49. CLAVE: A
 8. E. Ortí, J. Sánchez-Marín, P.M. Viruela-Martín, F. Tomás
"Molecular Conformation and Electronic Structure of 1,1'-Bipyrrrole. An Ab Initio Approach"
Chem. Phys. Lett. **1986**, 130, 285-290. CLAVE: A
 9. J. Piera, E. Ortí, J. Planelles, F. Tomás
"On the Phenol-Pyridine Hydrogen Bond Complex"
An. Quim., Ser. A **1986**, 82, 201-203. CLAVE: A
 10. S. Carbó, J. Planelles, E. Ortí, P. Viruela, F. Tomás
"On C₄H₉⁺ Energy Hypersurface"
J. Mol. Struct., Theochem **1987**, 150, 33-49. CLAVE: A
 11. E. Ortí, J. Sánchez-Marín, M. Merchán, F. Tomás
"Theoretical Approach to the Molecular Conformation of Nonfused Biheterocycles. Bifurans and Furylpyrrroles"
J. Phys. Chem. **1987**, 91, 545-551. CLAVE: A
-

12. P.M. Viruela-Martín, I. Nebot-Gil, R. Viruela-Martín, E. Ortí
"Estudio Teórico MINDO/3 de la Isomerización del Ion 3-Metilciclohexenio a los Iones 1,2- y 1,3-Dimetilciclopenteno"
An. Quim., Ser. A **1987**, 83, 522-529. CLAVE: A

13. F. Torrens, J. Sánchez-Marín, E. Ortí, I. Nebot-Gil
"Incorporation of a Dispersion Energy Term to Fraga's Atom-Atom Pair Intermolecular Potential. Application to Benzene, s-Tetrazine, and Their Mixed Dimers"
J. Chem. Soc., Perkin Trans. **1987**, 2, 943-950. CLAVE: A

14. E. Ortí, J. Sánchez-Marín, F. Tomás
"Conformational Behaviour of Nonfused Bipentaheterocycles. Dependence on Interannular Environment"
J. Chim. Phys. **1987**, 84, 729-734. CLAVE: A

15. M. Merchán, I. Nebot-Gil, R. González-Luque, E. Ortí
"A CI Study of the CuCO and CuCO⁺ Complexes"
J. Chem. Phys. **1987**, 87, 1690-1700. CLAVE: A

16. E. Ortí, Ph. Lambin, J.L. Brédas, J.P. Vigneron, E.G. Derouane, A.A. Lucas, J.M. André
"Band Structure of YBa₂Cu₃O_x in relation with the Oxygen Vacancy Distribution"
Solid State Commun. **1987**, 64, 313-316. CLAVE: A

17. E. Ortí, J.L. Brédas
"Theoretical Characterization of the Electronic Structure of Phthalocyanine and Related Macrocycles"
NATO-ASI Series, Series B **1987**, 172, 501-505. CLAVE: A

18. R. Viruela-Martín, I. Nebot-Gil, P.M. Viruela-Martín, E. Ortí
"Theoretical EHT Study of Isobutene Adsorption on Model Clusters of First Series Transition Metal Oxides and MgO"
J. Mol. Catal. **1988**, 43, 303-314. CLAVE: A

19. E. Ortí, J.L. Brédas
"Electronic Structure of Metal-Free Phthalocyanine: A Valence Effective Hamiltonian Theoretical Study"
J. Chem. Phys. **1988**, 89, 1009-1016. CLAVE: A

20. E. Ortí, J.L. Brédas
"Theoretical Approach to the Electronic Structure of Phthalocyanine: from the Molecule to the Crystal"
Synth. Met. **1989**, 29, F115-F122. CLAVE: A

21. E. Ortí, J.L. Brédas
"Theoretical Investigation of Three-Dimensional Phthalocyanine Structures: Comparison of the Electronic Properties of a Model System for Cyano(phthalocyaninato)cobalt(III) with Metal-Free β-Phthalocyanine"
Synth. Met. **1989**, 33, 27-35. CLAVE: A

22. E. Ortí, S. Stafström, J.L. Brédas
"The Valence Electronic Structure of Isotactic Polystyrene Revisited"
Chem. Phys. Lett. **1989**, 164, 240-246. CLAVE: A

23. E. Ortí, J.L. Brédas
"Electronic Structure of Metal-Free Porphine: A Valence Effective Hamiltonian Theoretical Investigation"
Chem. Phys. Lett. **1989**, 164, 247-252. CLAVE: A

24. E. Ortí, J.L. Brédas, C. Clarisse
"Electronic Structure of Phthalocyanines: Theoretical Investigation of the Optical Properties of Phthalocyanine Monomers, Dimers, and Crystals"
J. Chem. Phys. **1990**, 92, 1228-1235. CLAVE: A

25. E. Ortí, M.C. Piqueras, R. Crespo, J.L. Brédas
 "Influence of Annellation on the Electronic Properties of Phthalocyanine Macrocyces"
Chem. Mat. **1990**, 2, 110-116. CLAVE: A
26. E. Ortí, J.L. Brédas, J.J. Pireaux, N. Ishihara
 "Valence Electronic Structure of Polystyrenes with Different Tacticities: How to Go (or not to Go) too Far? A Joint Theoretical and Experimental Approach"
J. Electron Spectrosc. Rel. Phenom. **1990**, 52, 551-570. CLAVE: A
27. E. Ortí, J.L. Brédas
 "Macrocyces as Molecular Units to Build up Electroresponsive Materials: A Comparative Theoretical Investigation of the Electronic and Optical Properties of Phthalocyanine and Related Systems"
NATO-ASI Series, Series E **1990**, 182, 517-530. CLAVE: A
28. R. Lazzaroni, M. Lögdlund, S. Stafström, W.R. Salaneck, D.D.C. Bradley, R.H. Friend, N. Sato, E. Ortí, J.L. Brédas
 "Electronic Structure of Processable Conducting Polymers"
NATO-ASI Series, Series E **1990**, 182, 149-162. CLAVE: A
29. J. Delhalle, J. Messier, E. Ortí, P. Sautet, R. Silbey, Z.G. Soos, J.M. Toussaint
 "Working Group Report on Theoretical Developments"
NATO-ASI Series, Series E **1990**, 182, 591-593. CLAVE: A
30. F. Torrens, E. Ortí, J. Sánchez-Marín
 "Structural and Charge Effects on the Phthalocyanine Dimer"
 in *Modelling of Molecular Structures and Properties*, J.-L. Rivail (Ed.), Elsevier, Amsterdam, 1990, p. 221-228. CLAVE: A
31. E. Ortí, R. Crespo, M.C. Piqueras
 "The Influence of Conformation on the Electronic Properties of Polysilanes"
Synth. Met. **1991**, 42, 1575-1581. CLAVE: A
32. E. Ortí, R. Crespo, M.C. Piqueras
 "Band Structure Calculations on One-Dimensional Stacks of Extended Phthalocyanine-Based Macrocyces"
Synth. Met. **1991**, 42, 2647-2652. CLAVE: A
33. R. Crespo, M.C. Piqueras, E. Ortí, J.L. Brédas
 "Electronic Structure of Polysilane Oligomers"
Synth. Met. **1991**, 43, 3457-3462. CLAVE: A
34. E. Ortí, M.C. Piqueras, R. Crespo, F. Tomás
 "Theoretical Characterization of the Electronic Structure of Poly(Heteroaromatic Vinylenes)"
NATO-ASI Series, Series B **1991**, 248, 447-454. CLAVE: A
35. E. Ortí, M.C. Piqueras, R. Crespo
 "Theoretical Design of Organic Metals Based on the Phthalocyanine Macrocycle"
NATO-ASI Series, Series B **1991**, 248, 455-460. CLAVE: A
36. F. Torrens, E. Ortí, J. Sánchez-Marín
 "Electrically Conductive Phthalocyanine Assemblies. Structural and Non-Integer Oxidation Number Considerations"
NATO-ASI Series, Series B **1991**, 248, 461-466. CLAVE: A
37. F. Torrens, E. Ortí, J. Sánchez-Marín
 "Pair Potential Calculation of Molecular Associations: A Vectorized Version"
Comput. Phys. Commun. **1991**, 66, 341-362. CLAVE: A

38. F. Torrens, E. Ortí, J. Sánchez-Marín
 "Calculation of Geometrical Descriptors and Topological Indices of Molecules. A Vectorized Program"
 in *High Performance Computing II*, M. Durand and F. El Dabaghi (Eds.), North Holland, 1991,
 p. 549-560. CLAVE: A
39. F. Torrens, E. Ortí, J. Sánchez-Marín
 "Improved AMYR program: An Algorithm for the Theoretical Simulation of Molecular Associations Including
 Geometrical and Topological Characterization of the Dimers"
J. Mol. Graph. **1991**, 9, 254-256. CLAVE: A
40. M. Chtaib, J. Ghijssen, J.J. Pireaux, R. Caudano, R.L. Johnson, E. Ortí, J.L. Brédas
 "Photoemission Study of the Copper/Poly(Ethylene Terephthalate) Interface"
Phys. Rev. B **1991**, 44, 10815-10825. CLAVE: A
41. F. Torrens, E. Ortí, J. Sánchez-Marín
 "Vectorized TOPO Program for the Theoretical Simulation of Molecular Shape"
J. Chim. Phys. **1991**, 88, 2435-2441. CLAVE: A
42. E. Ortí, R. Crespo, M.C. Piqueras
 "Theoretical Investigation of the Electronic Properties of Poly(Thienylene Vinylenes) and Poly(Furylene Vinylenes)"
J. Mol. Struct., Theochem **1992**, 254, 243-251. CLAVE: A
43. R. Viruela-Martín, P. Viruela-Martín, E. Ortí
 "Electronic Structure of Tetraphenyldithiapyranilidene: A Valence Effective Hamiltonian Theoretical Investigation"
J. Chem. Phys. **1992**, 96, 4474-4483. CLAVE: A
44. E. Ortí, R. Viruela, J.L. Brédas, J.J. Pireaux
 "Valence Electronic Structure of PMMA: Theoretical Analysis of Experimental XPS Spectra"
 in *Polymer-Solid Interfaces*, J.J. Pireaux, J.L. Brédas, and P. Bertrand (Eds.), Adam Hilger, Bristol, 1992,
 p. 325-336. CLAVE: A
45. E. Ortí, J.L. Brédas
 "Photoelectron Spectra of Phthalocyanine Thin Films: A Valence Band Theoretical Interpretation"
J. Am. Chem. Soc. **1992**, 114, 8669-8675. CLAVE: A
46. R. Viruela-Martín, P.M. Viruela-Martín, E. Ortí
 "Theoretical Determination of the Geometric and Electronic Structures of Oligorylenes and Poli(Peri-Naphthalene)"
J. Chem. Phys. **1992**, 97, 8470-8480. CLAVE: A
47. N. Ueno, Y. Kobayashi, T. Sekiguchi, H. Ikeura, K. Sugita, K. Honma, T. Tanaka, E. Ortí, R. Viruela
 "Valence Bands of Poly(Methylmethacrylate) and Photoion Emission in Vacuum Ultraviolet Region"
J. Appl. Phys. **1992**, 72, 5423-5428. CLAVE: A
48. E. Ortí, J. Planelles
 "A Revision of the Paper: Grid of Expressions Related to the Einstein Coefficients"
J. Chem. Educ. **1992**, 69, 685-686. CLAVE: A
49. R. Crespo, M.C. Piqueras, E. Ortí, F. Tomás
 "Theoretical Investigation on the Effects of Methyl Substitution on the Electronic Properties of Polysilane"
Synth. Met. **1993**, 54, 173-179. CLAVE: A
50. E. Ortí, R. Crespo, M.C. Piqueras, F. Tomás, J.L. Brédas
 "Electronic Structure of Polysilanes: Influence of Substitution and Conformation"
Synth. Met. **1993**, 57, 4419-4424. CLAVE: A

51. R. Crespo, M.C. Piqueras, E. Ortí, F. Tomás
"Theoretical Study on the Effect of Backbone Conformation on the Electronic Structure of Poly(Di-n-Butylsilane)"
Synth. Met. **1993**, 57, 4425-4430. CLAVE: A
52. M.C. Piqueras, R. Crespo, E. Ortí, F. Tomás
"Electronic Properties of Poly(Pyrrylene Vinylenes): A Theoretical Approach"
Synth. Met. **1993**, 54, 181-186. CLAVE: A
53. M.C. Piqueras, R. Crespo, E. Ortí, F. Tomás
"Theoretical Search for Low-Band-Gap Vinylene Linked Polymers: Heteroarylene Vinylene Copolymers"
Synth. Met. **1993**, 57, 4565-4571. CLAVE: A
54. M.C. Piqueras, R. Crespo, E. Ortí, F. Tomás
"Structural and Electronic Properties of Oligomeric Heteroarylene Vinylenes: A Theoretical Approach"
Mol. Cryst. Liq. Cryst. **1993**, 236, 219-224. CLAVE: A
55. E. Ortí, M.C. Piqueras, R. Crespo, F. Tomás
"Influence of Structural Isomerism on the Electronic Properties of Extended Phthalocyanines"
Mol. Cryst. Liq. Cryst. **1993**, 234, 241-246. CLAVE: A
56. E. Ortí, R. Crespo, M.C. Piqueras, P.M. Viruela, F. Tomás
"Theoretical Calculations on the Valence Electronic Structure of Naphthalocyanine: Comparison with Experimental Photoemission Data"
Synth. Met. **1993**, 57, 4513-4518. CLAVE: A
57. E. Ortí, M.C. Piqueras, R. Crespo, F. Tomás
"Theoretical Characterization of the Electronic Properties of Unsymmetrical Phthalocyanine Analogues"
Synth. Met. **1993**, 57, 4519-4524. CLAVE: A
58. P. Viruela-Martín, R. Viruela-Martín, E. Ortí
"Geometric and Electronic Structure of Dithiapyranilidene: Evolution upon Oxidation"
Synth. Met. **1993**, 57, 4572-4578. CLAVE: A
59. P. Viruela-Martín, R. Viruela-Martín, F. Tomás, E. Ortí
"Valence Electronic Structure of C₆₀: Theoretical Analysis of Photoemission Data"
Synth. Met. **1993**, 56, 3246-3251. CLAVE: A
60. M.C. Piqueras, R. Crespo, E. Ortí, F. Tomás
"AM1 Prediction of the Equilibrium Geometry of Si₆₀"
Chem. Phys. Lett. **1993**, 213, 509-513. CLAVE: A
61. R. Crespo, M.C. Piqueras, E. Ortí, F. Tomás
"VEH Electronic Band Structure of Poly(phenylsilane)"
Synth. Met. **1993**, 61, 107-111. CLAVE: A
62. M.C. Piqueras, R. Crespo, E. Ortí, F. Tomás
"Evolution of the Electronic Properties of graded Poly(thienylene vinylene)-Poly(pyrrylene vinylene) Mixed Copolymers"
Synth. Met. **1993**, 61, 151-154. CLAVE: A
63. M.C. Piqueras, R. Crespo, E. Ortí, F. Tomás
"VEH Electronic Structure of Si₆₀"
Synth. Met. **1993**, 61, 155-158. CLAVE: A
64. M. Rubio, M. Merchán, E. Ortí, B.O. Roos
"A Theoretical Study of the Electronic Spectrum of Naphthalene"

- Chem. Phys.* **1994**, *179*, 395-409. CLAVE: A
65. M. Merchán, E. Ortí, B.O. Roos
 "Ground-State Free Base Porphin: C_{2v} or D_{2h} Symmetry? A Theoretical Contribution"
Chem. Phys. Lett. **1994**, *221*, 136-144. CLAVE: A
66. E. Ortí
 "Electronic Structure of Phthalocyanine and Phthalocyanine Analogues"
 in *New Organic Materials*, C. Seoane and N. Martín (Eds.), Univ. Complutense de Madrid, Madrid, 1994,
 pp. 115-143. CLAVE: CL
67. M. Merchán, E. Ortí, B.O. Roos
 "Theoretical Determination of the Electronic Spectrum of Free Base Porphin"
Chem. Phys. Lett. **1994**, *226*, 27-36. CLAVE: A
68. P. Bando, N. Martín, J.L. Segura, C. Seoane, E. Ortí, P.M. Viruela, R. Viruela, A. Albert, F.H. Cano
 "Single-Component Donor-Acceptor Organic Semiconductors Derived from TCNQ"
J. Org. Chem. **1994**, *59*, 4618-4629. CLAVE: A
69. M. González, P. de Miguel, N. Martín, J.L. Segura, C. Seoane, E. Ortí, R. Viruela, P.M. Viruela
 "The First Sulfur-Containing Twin-DCNQI-Type Acceptor"
Adv. Mater. **1994**, *6*, 765-768. CLAVE: A
70. M. Rubio, M. Merchán, E. Ortí, B.O. Roos
 "A Theoretical Study of the Electronic Spectrum of Bithiophene"
J. Chem. Phys. **1995**, *102*, 3580-3586. CLAVE: A
71. P.M. Viruela, R. Viruela, E. Ortí
 "Influence of Nitrogen Substitution on the Electronic Band Structure of Poly(*peri*-naphthalene)"
Synth. Met. **1995**, *69*, 705-706. CLAVE: A
72. M. Rubio, M. Merchán, E. Ortí
 "The Internal Rotational Barrier of Biphenyl Studied with Multiconfigurational Second-Order Perturbation Theory (CASPT2)"
Theoret. Chim. Acta **1995**, *91*, 17-29. CLAVE: A
73. R. Viruela, P.M. Viruela, E. Ortí, N. Martín
 "Molecular and Electronic Structure of Largely Extended Tetracyanoquinodimethanes"
Synth. Met. **1995**, *70*, 1031-1032. CLAVE: A
74. M. Boronat, R. Viruela, E. Ortí
 "Electronic Structure of Novel Phthalocyanine Analogues Containing the 1,2,4-Triazole Unit"
Synth. Met. **1995**, *71*, 2291-2292. CLAVE: A
75. M. Rubio, M. Merchán, E. Ortí, B.O. Roos
 "A Theoretical Study of the Electronic Spectrum of Biphenyl"
Chem. Phys. Lett. **1995**, *234*, 373-381. CLAVE: A
76. E. Ortí, P.M. Viruela, J. Sánchez-Marín, F. Tomás
 "Ab Initio Determination of the Geometric Structure and Internal Rotation Potential of 2,2'-Bithiophene"
J. Phys. Chem. **1995**, *99*, 4955-4963. CLAVE: A
77. M. Rubio, J. Sánchez-Marín, E. Ortí
 "Theoretical Description of the Fluoranthene-Fluoranthene Association Using Atom-Atom Pair Potentials"
Synth. Met. **1995**, *71*, 2081-2082. CLAVE: A

78. N. Martín, J.L. Segura, C. Seoane, P. de la Cruz, F. Langa, E. Ortí, P.M. Viruela, R. Viruela
 "Synthesis and Characterization of 11,11,12,12-Tetracyano-1,4-anthraquinodimethanes (1,4-TCAQs): Novel Electron Acceptors with Photoinduced Charge-Transfer Properties"
J. Org. Chem. **1995**, *60*, 4077-4084. CLAVE: A
79. B. Illescas, N. Martín, J.L. Segura, C. Seoane, E. Ortí, P.M. Viruela, R. Viruela
 "Synthesis and Characterization of Novel Donor-Acceptor Naphthoquinone Derivatives with Photoinduced Charge-Transfer Properties. A Joint Experimental and Theoretical Study"
J. Org. Chem. **1995**, *60*, 5643-5650. CLAVE: A
80. M. Rubio, M. Merchán, E. Ortí, B.O. Roos
 "Theoretical Study of the Electronic Spectra of the Biphenyl Cation and Anion"
J. Phys. Chem. **1995**, *99*, 14980-14987. CLAVE: A
81. B. Illescas, N. Martín, J.L. Segura, C. Seoane, E. Ortí, P.M. Viruela, R. Viruela
 "6,11-Bis(dicyanomethylene)-12-methylbenzo[b]phenoxazine and 6,11-Dicyanimino-12-methylbenzo[b]phenoxazine as Novel Donor-Acceptor Systems"
J. Mater. Chem. **1995**, *5*, 1563-1570. CLAVE: A
82. A.S. Batsanov, M.R. Bryce, J.N. Heaton, A.J. Moore, P.J. Skabara, J.A.K. Howard, E. Ortí, P.M. Viruela, R. Viruela
 "New Functionalised Tetrathiafulvalenes: X-Ray Crystal Structures and Physico-Chemical Properties of TTF-C(O)NMe₂ and TTF-C(O)-O-C₄H₉: A Joint Experimental and Theoretical Study"
J. Mater. Chem. **1995**, *5*, 1689-1696. CLAVE: A
83. E. Ortí, R. Viruela, P.M. Viruela
 "A Theoretical Study of the Molecular and Electronic Structure of Benzoannulated Tetracyanoquinodimethanes"
J. Mater. Chem. **1995**, *5*, 1697-1705. CLAVE: A
84. M. Rubio, E. Ortí, J. Sánchez-Marín
 "A Study of Coronene-Coronene Association using Atom-Atom Pair Potentials"
Int. J. Quantum Chem. **1996**, *57*, 567-573. CLAVE: A
85. M. Rubio, M. Merchán, E. Ortí, B.O. Roos
 "A Theoretical Study of the Electronic Spectrum of Terthiophene"
Chem. Phys. Lett. **1996**, *248*, 321-328. CLAVE: A
86. E. Ortí, R. Viruela, P.M. Viruela
 "Influence of Benzoannulation on the Molecular and Electronic Structure of Tetracyanoquinodimethanes"
J. Phys. Chem. **1996**, *100*, 6138-6146. CLAVE: A
87. N. Martín, J.L. Segura, C. Seoane, E. Ortí, P.M. Viruela, R. Viruela, A. Albert, F.H. Cano, J. Vidal, C. Rovira, J. Veciana
 "Synthesis, Characterization, and Theoretical Study of Sulfur-Containing Donor-Acceptor DCNQI Derivatives with Photoinduced Intramolecular Electron Transfer"
J. Org. Chem. **1996**, *61*, 3041-3054. CLAVE: A
88. E. Ortí, R. Crespo, M.C. Piqueras, F. Tomás
 "Theoretical Determination of the Molecular and Solid-State Electronic Structures of Phthalocyanine and Largely Extended Phthalocyanine Macrocycles"
J. Mater. Chem. **1996**, *6*, 1751-1761. CLAVE: A
89. M. Boronat, E. Ortí, P.M. Viruela, F. Tomás
 "Theoretical Study of the N-H Tautomerism in Free Base Porphyrin"
J. Mol. Struct., Theochem **1997**, *390*, 149-156. CLAVE: A

90. P.M. Viruela, R. Viruela, E. Ortí, J.L. Brédas
 “Geometric Structure and Torsional Potential of Biisothianaphthene. A Comparative DFT and ab Initio Study”
J. Am. Chem. Soc. **1997**, *119*, 1360-1369. CLAVE: A
91. B. Knight, N. Martín, T. Ohno, E. Ortí, C. Rovira, J. Veciana, J. Vidal-Gancedo, P. Viruela, R. Viruela, F. Wudl
 “Synthesis and Electrochemistry of Electronegative Spiroannulated Methanofullerenes: Theoretical Underpinning of the Electronic Effect of Addends and a Reductive Cyclopropane Ring-Opening Reaction”
J. Am. Chem. Soc. **1997**, *119*, 9871-9882. CLAVE: A
92. N. Martín, L. Sánchez, C. Seoane, R. Andreu, J. Garín, J. Orduna, E. Ortí, P.M. Viruela, R. Viruela
 “Synthesis, Properties and Charge Transfer Complexes of Covalently Attached [60]Fullerene-Tetrathiafulvalenes”
J. Phys. Chem. Solids **1997**, *58*, 1713-1718. CLAVE: A
93. B.M. Illescas, N. Martín, C. Seoane, E. Ortí, P.M. Viruela, R. Viruela, A. de la Hoz
 “Reaction of C₆₀ with Sultines: Synthesis, Electrochemistry, and Theoretical Calculations of Organofullerene Acceptors”
J. Org. Chem. **1997**, *62*, 7585-7591. CLAVE: A
94. N. Martín, L. Sánchez, C. Seoane, E. Ortí, P.M. Viruela, R. Viruela
 “Synthesis, Properties, and Theoretical Characterization of Largely π -Extended Tetrathiafulvalene Derivatives with Quinonoid Structures”
J. Org. Chem. **1998**, *63*, 1268-1279. CLAVE: A
95. A.J. Moore, M.R. Bryce, A.S. Batsanov, A. Green, J.A.K. Howard, M.A. McKervey, P. McGuigan, I. Ledoux, E. Ortí, R. Viruela, P.M. Viruela, B. Tarbit
 “New 1,3-Dithiol-2-Ylidene Donor- π -Acceptor Chromophores with Intramolecular Charge-Transfer Properties, and Related Donor- π -Donor Molecules: Synthesis, Electrochemistry, X-Ray Crystal Structures, Non-linear Optical Properties and Theoretical Calculations”
J. Mater. Chem. **1998**, *8*, 1173-1184. CLAVE: A
96. R. Viruela, P.M. Viruela, E. Ortí
 “Benzoannulated Quinone-Type Electron Acceptors: Evolution of the Molecular and Electronic Structures upon Reduction”
J. Mol. Struct., Theochem **1998**, *426*, 135-143. CLAVE: A
97. P.M. Viruela, R. Viruela, E. Ortí
 “Difficulties of Density Functional Theory in Predicting the Torsional Potential of 2,2'-Bithiophene”
Int. J. Quantum Chem. **1998**, *70*, 303-312. CLAVE: A
98. A.S. Batsanov, M.R. Bryce, M.A. Coffin, A. Green, R.E. Hester, J.A.K. Howard, I.K. Lednev, N. Martín, A.J. Moore, J.N. Moore, E. Ortí, L. Sánchez, M. Savirón, P.M. Viruela, R. Viruela, T.-Q. Ye
 “Donor- π -Acceptor Species Derived from Functionalised 1,3-Dithiol-2-Ylidene Anthracene Donor Units Exhibiting Photoinduced Electron Transfer Properties: Spectroscopic, Electrochemical, X-Ray Crystallographic and Theoretical Studies”
Chem. Eur. J. **1998**, *4*, 2580-2592. CLAVE: A
99. B. Illescas, N. Martín, L. Sánchez, I. Pérez, M.A. Herranz, S. González, E. Ortí, P.M. Viruela, R. Viruela
 “C₆₀-Based Electron Acceptor Organofullerenos”
 in *Recent Advances in the Chemistry and Physics of Fullerenes and Related Materials*, K.M. Kadish and R.S. Ruoff (Eds.), The Electrochemical Society Inc., 1998, Vol. 6, p. 1127-1144. CLAVE: A
100. E. Ortí, M.J. Sanchís, P.M. Viruela, R. Viruela
 “Effects of Carbon-sp³ Bridging on the Electronic Properties of Oligothiophenes”
Synth. Met. **1999**, *101*, 602-603. CLAVE: A
101. N. Martín, L. Sánchez, E. Ortí, R. Viruela

- "Acene-Type Donors Bearing One 1,3-Dithiole Ring"
Synth. Met. **1999**, *102*, 1635-1636. CLAVE: A
102. R. Pou-Amérigo, M. Merchán, E. Ortí
 "Theoretical Study of the Electronic Spectrum of *p*-Benzoquinone"
J. Chem. Phys. **1999**, *110*, 9536-9546. CLAVE: A
103. N. Martín, E. Ortí, L. Sánchez, P.M. Viruela, R. Viruela
 "A New Type of π -Electron Donors with One Dithiole Unit: Substituted 7-(1,3-Dithiol-2-Ylidene)-7-Hydrobenz[*d,e*]anthracenes"
Eur. J. Org. Chem. **1999**, 1239-1247. CLAVE: A
104. R. Viruela, P.M. Viruela, R. Pou-Amérigo, E. Ortí
 "Flexibility of TTF. A Theoretical Study"
Synth. Met. **1999**, *103*, 1991-1992. CLAVE: A
105. N. Terkia-Derdra, R. Andreu, M. Sallé, E. Levillain, J. Orduna, J. Garín, E. Ortí, R. Viruela, R. Pou-Amérigo, B. Sahraoui, A. Gorgues, J.-F. Favard, A. Riou
 " π -Conjugation across the Tetrathiafulvalene Core: Synthesis of Extended Tetrathiafulvalene Derivatives and Theoretical Analysis of their Unusual Electrochemical Properties"
Chem. Eur. J. **2000**, *6*, 1199-1213. CLAVE: A
106. R. Pou-Amérigo, L. Serrano-Andrés, M. Merchán, E. Ortí, N. Forsberg
 "A Theoretical Determination of the Low-Lying Electronic States of the *p*-Benzosemiquinone Radical Anion"
J. Am. Chem. Soc. **2000**, *122*, 6067-6077. CLAVE: A
107. P.J. Skabara, R. Berridge, K. Prescott, L.M. Goldenberg, E. Ortí, R. Viruela, R. Pou-Amérigo, A.S. Batsanov, J.A.K. Howard, S.J. Coles, and M.B. Hursthouse
 "Experimental and Theoretical Studies into the Structural Perturbations between Neutral, Oxidised and Reduced Forms of 1,4-Dithiinoquinoxaline Derivatives"
J. Mater. Chem. **2000**, *10*, 2448-2457. CLAVE: A
108. L.M. Goldenberg, P.J. Skabara, D.M. Roberts, R. Berridge, E. Ortí, P.M. Viruela, R. Pou-Amérigo
 "Electrochemical Molecular Recognition of Silver Cation by Electropolymerised thieno[3',4':5,6][1,4]dithiino [2,3-*b*]quinoxaline: A Joint Experimental and Theoretical Study"
J. Mater. Chem. **2000**, *10*, 2458-2465. CLAVE: A
109. N. Martín, E. Ortí
 "Quinonoid π -Extended Tetrathiafulvalenes (TTFs)"
 in *Handbook of Advanced Electronic and Photonic materials and Devices*, H.S. Nalwa (Ed.), Academic Press, San Diego, 2001, Vol. 3, Chap. 6, pp. 245-265. CLAVE: CL
110. E. Ortí, R. Viruela, P.M. Viruela
 "Moléculas Precursoras de Sistemas Conductores: Relación entre la Estructura Molecular y la Estructura Electrónica"
 in *Los Materiales Moleculares en España en el Umbral del Siglo XXI*, P. Vázquez, T. Torres, and N. Martín (Eds.), UAM Ediciones, Madrid, 2001, pp. 271-288. CLAVE: CL
111. M. Rubio, E. Ortí, R. Pou-Amérigo, M. Merchán
 "Electronic Spectra of 2,2'-Bithiophene and 2,2':5',2"-Terthiophene Radical cations: A Theoretical Analysis"
J. Phys. Chem. A **2001**, *105*, 9788-9794. CLAVE: A
112. R. Pou-Amérigo, E. Ortí, M. Merchán, M. Rubio, P.M. Viruela
 "Electronic Transitions in Tetrathiafulvalene and Its Radical Cation: A Theoretical Contribution"
J. Phys. Chem. A **2002**, *106*, 631-640. CLAVE: A

113. R. Pou-Amérigo, P.M. Viruela, R. Viruela, M. Rubio, E. Ortí
 "Electronic Spectra of Tetrathiafulvalene and Its Radical Cation: Analysis of the Performance of the Time-Dependent DFT Approach"
Chem. Phys. Lett. **2002**, 352, 491-498. CLAVE: A
114. J. Casado, L.L. Miller, K.R. Mann, T.M. Pappenfus, Y. Kanemitsu, E. Ortí, P.M. Viruela, R. Pou-Amérigo, V. Hernández, J.T. López-Navarrete
 "Combined Spectroelectrochemical and Theoretical Study of a Vinylene-Bridged Sexithiophene Cooligomer: Analysis of the π -Electron Delocalization and of the Electronic Defects Generated upon doping"
J. Phys. Chem. B **2002**, 106, 3872-3881. CLAVE: A
115. J. Casado, L.L. Miller, K.R. Mann, T.M. Pappenfus, H. Higuchi, E. Ortí, B. Milián, R. Pou-Amérigo, V. Hernández, J.T. López-Navarrete
 "Quinonoid Oligothiophenes as Electron-Donor and Electron-Acceptor Materials. A Spectroelectrochemical and Theoretical Study"
J. Amer. Chem. Soc. **2002**, 124, 12380-12388. CLAVE: A
116. J. Casado, T.M. Pappenfus, L.L. Miller, K.R. Mann, E. Ortí, P.M. Viruela, R. Pou-Amérigo, V. Hernández, J.T. López-Navarrete
 "Nitro-Functionalized Oligothiophenes as a Novel Type of Electroactive Molecular Materials. A Spectroscopic, Electrochemical, and Computational Study"
J. Amer. Chem. Soc. **2003**, 125, 2524-2534. CLAVE: A
117. P.M. Viruela, R. Viruela, E. Ortí, J. Casado, V. Hernández, J.T. López-Navarrete
 "Theoretical description of the Raman spectrum of a vinylene-bridged quaterthiophene oligomer"
J. Mol. Struct. **2003**, 651-653, 657-664. CLAVE: A
118. B. Milián, R. Pou-Amérigo, R. Viruela, E. Ortí
 "Theoretical Study of the Molecular Structure and the Stability of Neutral and Reduced Tetracyanoethylene"
Chem. Phys. Lett. **2003**, 375, 376-382. CLAVE: A
119. J. Casado, T.M. Pappenfus, K.R. Mann, B. Milián, E. Ortí, P.M. Viruela, M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J.T. López-Navarrete
 "UV-Vis, IR, Raman and Theoretical Characterization of a Novel Quinoid Oligothiophene Molecular Material"
J. Mol. Struct. **2003**, 651-653, 665-673. CLAVE: A
120. C. Wartelle, R. Viruela, P.M. Viruela, F.X. Sauvage, M. Sallé, E. Ortí, E. Levillain, F. Le Derf
 "First Signals of Electrochemically Oxidized Species of TTF and TTM-TTF: A Study by *in situ* Spectroelectrochemical FTIR and DFT Calculations"
Phys. Chem. Chem. Phys. **2003**, 5, 4672-4679. CLAVE: A
121. B. Milián, E. Ortí, V. Hernández, J.T. López-Navarrete, T. Otsubo
 "Spectroscopic and Theoretical Study of Push-Pull Chromophores Containing Thiophene-Based Quinonoid Structures as Electron Spacers"
J. Phys. Chem. B **2003**, 107, 12175-12183. CLAVE: A
122. M. Rubio, M. Merchán, R. Pou-Amérigo, E. Ortí
 "The Low-Lying Excited States of 2,2'-Bithiophene: A Theoretical Analysis"
ChemPhysChem **2003**, 4, 1308-1315. CLAVE: A
123. J. Casado, T.M. Pappenfus, K.R. Mann, E. Ortí, P.M. Viruela, B. Milián, V. Hernández, J.T. López-Navarrete
 "Spectroscopic and Theoretical Study of the Molecular and Electronic Structures of a Terthiophene-Based Quinodimethane"
ChemPhysChem **2004**, 5, 529-539. CLAVE: A
124. M.C. Díaz, B.M. Illescas, N. Martín, R. Viruela, P.M. Viruela, E. Ortí, O. Brede, I. Zilbermann, D.M. Guldi
 "Highly Conjugated *p*-Quinonoid π -Extended Tetrathiafulvalene Derivatives: A Class of Highly Distorted Electron Donors"
Chem. Eur. J. **2004**, 10, 2067-2077. CLAVE: A
125. B. Milián, R. Pou-Amérigo, R. Viruela, E. Ortí
 "On the Electron Affinity of TCNQ"

- Chem. Phys. Lett.* **2004**, 391, 148-151. CLAVE: A
126. R. Berridge, I.M. Serebryakov, P.J. Skabara, E. Ortí, R. Viruela, R. Pou-Amérigo, S.J. Coles, M.B. Hursthouse
"A New Series of π -Extended Tetrathiafulvalene Derivatives Incorporating Fused Furanodithiino and Thienodithiino Units: A Joint Experimental and theoretical Study"
J. Mater. Chem. **2004**, 14, 2822-2830. CLAVE: A
127. B. Milián, R. Pou-Amérigo, R. Viruela, E. Ortí
"A Theoretical Study of Neutral and Reduced Tetracyano-*p*-quinodimethane (TCNQ)"
J. Mol. Struct., Theochem **2004**, 709, 97-102. CLAVE: A
128. B. Milián, R. Pou-Amérigo, M. Merchán, E. Ortí
"Theoretical Study of the Electronic Excited States of Tetracyanoethylene and its Radical Anion"
ChemPhysChem **2005**, 6, 503-510. CLAVE: A
129. C. Wartelle, P.M. Viruela, R. Viruela, E. Ortí, F.X. Sauvage, E. Levillain, F. Le Derf, M. Sallé
"A Study by Spectroelectrochemical FTIR and Density Functional Theory Calculations of the Reversible Complexing Ability of an Electroactive Tetrathiafulvalene Crown"
J. Phys. Chem. A **2005**, 109, 1188-1195. CLAVE: A
130. P. Sandín, A. Martínez-Grau, L. Sánchez, C. Seoane, R. Pou-Amérigo, E. Ortí, N. Martín
"The First Spiroconjugated TTF- and TCNQ-Type Molecules: A New Class of Electroactive Systems?"
Org. Lett. **2005**, 7, 295-298. CLAVE: A
131. M. Rubio, M. Merchán, E. Ortí
"A Theoretical Study on the Low-Lying Excited States of 2,2':5',2"-Terthiophene and 2,2':5',2":5",2"-Quaterthiophene"
ChemPhysChem, **2005**, 6, 1357-1368. CLAVE: A
132. E. Ortí, P.M. Viruela, R. Viruela, F. Effenberger, V. Hernández, J.T. López Navarrete
"Raman and Theoretical Study of the Solvent Effects on the Sizable Intramolecular Charge Transfer in the Push-Pull 5-(Dimethylamino)-5'-nitro-2,2'-bithiophene"
J. Phys. Chem. A, **2005**, 109, 8724-8731. CLAVE: A
133. J. Casado, M.Z. Zgierski, R.G. Hicks, D.J.T. Myles, P.M. Viruela, E. Ortí, M.C. Ruiz Delgado, V. Hernández, J.T. López Navarrete
"Mesitylthio-Oligothiophenes in Various Redox States. Molecular and Electronic Views as Offered by Spectroscopy and Theory"
J. Phys. Chem. A, **2005**, 109, 11275-11284. CLAVE: A
134. R. Ponce, J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, E. Ortí, P.M. Viruela, B. Milián, S. Hotta, G. Zotti, S. Zecchin, B. Vercelli
"Magnetic Properties of Quinoidal Oligothiophenes. More than Good Candidates for Ambipolar Organic Semiconductors?"
Adv. Funct. Mater., **2006**, 16, 531-536. CLAVE: A
135. M.C. Díaz, B.M. Illescas, N. Martín, I.F. Perepichka, M.R. Bryce, E. Levillain, R. Viruela, E. Ortí
"Electronic Interactions in a New π -Extended Tetrathiafulvalene Dimer"
Chem. Eur. J. **2006**, 12, 2709-2721. CLAVE: A
136. S. Amriou, C. Wang, A.S. Batsanov, M.R. Bryce, D.F. Perepichka, E. Ortí, R. Viruela, J. Vidal-Gancedo, C. Rovira
"The Interplay of Inverted Redox Potentials and Aromaticity in the Oxidized States of New π -Electron Donors: 9-(1,3-Dithiol-2-ylidene)fluorene and 9-(1,3-Dithiol-2-ylidene)thioxanthene Derivatives"
Chem. Eur. J. **2006**, 12, 3389-3400. CLAVE: A
137. G. Zotti, S. Zecchin, B. Vercelli, A. Berlin, J. Casado, V. Hernández, R. Ponce, J.T. López Navarrete, E. Ortí, P.M. Viruela, B. Milián
"Magnetic and Conductive Properties of Quinoidal Oligothiophenes"
Chem. Mater. **2006**, 18, 1539-1545. CLAVE: A
138. H.J. Bolink, L. Cappelli, E. Coronado, M. Grätzel, E. Ortí, R.D. Costa, P.M. Viruela, M.K. Nazeeruddin

- “Stable Single-Layer Light-Emitting Electrochemical Cell Using 4,7-Diphenyl-1,10-phenanthroline-bis(2-phenylpyridine)iridium(III) Hexafluorophosphate”
J. Am. Chem. Soc. **2006**, *128*, 14786-14787. CLAVE: A
139. E.M. Pérez, M. Sierra, L. Sánchez, M.R. Torres, R. Viruela, P.M. Viruela, E. Ortí, N. Martín
 “Concave Tetrathiafulvalene-Type Donors as Supramolecular Partners for Fullerenes”
Angew. Chem. Int. Ed. **2007**, *46*, 1847-1851. CLAVE: A
140. E.M. Priego, L. Sánchez, M.A. Herranz, N. Martín, R. Viruela, E. Ortí
 “Synthesis and Radical Coupling of Pyridine-Bridged π -Extended Tetrathiafulvalene (TTF)-Type Donors and Push-Pull Analogues”
Org. Biomol. Chem. **2007**, *5*, 1201-1209. CLAVE: A
141. H.J. Bolink, L. Cappelli, E. Coronado, R.D. Costa, M. Grätzel, M.K. Nazeeruddin, P.M. Viruela, E. Ortí
 “Improved Stability of Solid State Light Emitting Electrochemical Cells Consisting of Ruthenium and Iridium Complexes”
 in “Organic Electronics – Materials, Devices and Applications”
 Eds: F. So, G.B. Blanchet, Y. Ohmori
Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 965E, Warrendale, PA, **2007**, 0965-S03-04. CLAVE: A
142. R. Ponce Ortiz, J. Casado, V. Hernández, J.T. López Navarrete, P.M. Viruela, E. Ortí, K. Takimiya, T. Otsubo
 “On the Biradicaloid Nature of Long Quinoidal Oligothiophenes: New Experimental Evidences Guided by Theoretical Studies”
Angew. Chem. Int. Ed. **2007**, *46*, 9057-9061. CLAVE: A
143. H.J. Bolink, L. Cappelli, S. Cheylan, E. Coronado, R.D. Costa, N. Lardiés, Md.K. Nazeeruddin, E. Ortí
 “Origin of the Large Spectral Shift in Electroluminescence in a Blue Emitting Cationic Iridium(III) Complex”
J. Mater. Chem. **2007**, *17*, 5032-5041. CLAVE: A
144. A. Ortíz, B. Insuasty, M.R. Torres, M.A. Herranz, N. Martín, R. Viruela, E. Ortí
 “Aminopyrimidine-Based Donor–Acceptor Chromophores: Push–Pull versus Aromatic Behaviour”
Eur. J. Org. Chem. **2008**, 99-108. CLAVE: A
145. H.J. Bolink, E. Coronado, R.D. Costa, N. Lardiés, M.K. Nazeeruddin, E. Ortí
 “Unexpected Large Spectral Shift from Blue to Green Region in a Light-Emitting Electrochemical Cell”
 in “Organic Optoelectronics and Photonics III”
 Eds: P.L. Heremans, M. Muccini, E.A. Meulenkaamp; Proc. of SPIE Vol. 6999, **2008**, 69992L1-L12. CLAVE: A
146. E.M. Pérez, A.L. Capodilupo, G. Fernández, L. Sánchez, P.M. Viruela, R. Viruela, E. Ortí, M. Bietti, N. Martín
 “Weighting Non-Covalent Forces in the Molecular Recognition of C₆₀. Relevance of Concave-Convex Complementarity”
Chem. Commun. **2008**, 4567-4569. CLAVE: A
147. H.J. Bolink, E. Coronado, R.D. Costa, N. Lardiés, E. Ortí
 “Near-Quantitative Internal Quantum Efficiency in a Light-Emitting Electrochemical Cell”
Inorg. Chem. **2008**, *47*, 9149-9151. CLAVE: A
148. H.J. Bolink, E. Coronado, R.D. Costa, E. Ortí, M. Sessolo, S. Graber, K. Doyle, M. Neuburger, C.E. Housecroft, E.C. Constable
 “Long-Living Light-Emitting Electrochemical Cells – Control through Supramolecular Interactions”
Adv. Mater. **2008**, *20*, 3910-3913. CLAVE: A
149. S. Graber, K. Doyle, M. Neuburger, C.E. Housecroft, E.C. Constable, R.D. Costa, E. Ortí, D. Repetto, H.J. Bolink
 “A Supramolecularly-Caged Ionic Iridium(III) Complex Yielding Bright and Very Stable Solid-State Light-Emitting Electrochemical Cells”
J. Am. Chem. Soc. **2008**, *130*, 14944-14945. CLAVE: A
150. F. Reviriego, P. Navarro, E. García-España, M.T. Albelda, J.C. Frías, A. Domènech, M.J.-R. Yunta, R. Costa, E. Ortí

- "Diazatetraester 1*H*-Pyrazole Crowns as Fluorescent Chemosensors for AMPH, METH, MDMA (Ecstasy), and Dopamine"
Org. Lett. **2008**, *10*, 5099-5012. CLAVE: A
151. R.D. Costa, H.J. Bolink, E. Ortí, M. Sessolo, S. Graber, K. Doyle, M. Neuburger, C.E. Housecroft, E.C. Constable
 "Single molecule solid state light emitting electrochemical cells with lifetimes superior to 3000 hours"
 in "Organic and Hybrid Materials for Large-Area Functional Systems"
 Eds: A. Salleo, A.C. Arias, D.M. DeLongchamp, C.R. Kagan
 Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 1114E, Warrendale, PA, **2008**, 1114-G12-19. CLAVE: A
152. S.S. Gayathri, M. Wielopolski, E.M. Pérez, G. Fernández, L. Sánchez, R. Viruela, E. Ortí, D.M. Guldi, N. Martín
 "Discrete Supramolecular Donor-Acceptor Complexes"
Angew. Chem. Int. Ed. **2009**, *48*, 815-819. CLAVE: A
153. R.D. Costa, E. Ortí, H.J. Bolink, S. Graber, C.E. Housecroft, M. Neuburger, E.C. Constable
 "Two are not always better than one: ligand optimisation for long-living light-emitting electrochemical cells"
Chem. Commun. **2009**, 2029-2031. CLAVE: A
154. H.J. Bolink, E. Coronado, R.D. Costa, P. Gaviña, E. Ortí, S. Tatay
 "Deep-Red-Emitting Electrochemical Cells Based on Heteroleptic Bis-chelated Ruthenium(II) Complexes"
Inorg. Chem. **2009**, *48*, 3907-3909. CLAVE: A
155. R.D. Costa, F.J. Céspedes-Guirao, E. Ortí, H.J. Bolink, J. Gierschner, F. Fernández-Lázaro, A. Sastre-Santos
 "Efficient Deep-Red Light-Emitting Electrochemical Cells Based on a Perylenediimide-Iridium-Complex Dyad"
Chem. Commun. **2009**, 3886-3888. CLAVE: A
156. I. García Cuesta, J. Aragón, E. Ortí, P. Lazzeretti
 "Aromaticity of α -Oligothiophenes and Equivalent Oligothienoacenes"
J. Chem. Theory Comput. **2009**, *5*, 1767-1775. CLAVE: A
157. R.D. Costa, P.M. Viruela, H.J. Bolink, E. Ortí
 "Lowest Triplet Excited States of a Novel Heteroleptic Iridium(III) Complex and Their Role in the Emission Colour"
J. Mol. Struct., Theochem **2009**, *912*, 21-26. CLAVE: A
158. J. Aragón, P.M. Viruela, E. Ortí
 "From Linear Quaterthiophene to Sulflower: A Comparative Theoretical Study"
J. Mol. Struct., Theochem **2009**, *912*, 27-31. CLAVE: A
159. J.L. López, E.M. Pérez, P.M. Viruela, R. Viruela, E. Ortí, N. Martín
 "Controlled Self-Assembly of Electron Donor Nanotubes"
Org. Lett. **2009**, *11*, 4524-4527. CLAVE: A
160. R.D. Costa, F.J. Céspedes-Guirao, H.J. Bolink, F. Fernández-Lázaro, A. Sastre-Santos, E. Ortí, J. Gierschner
 "A Deep-Red-Emitting Perylenediimide-Iridium-Complex Dyad: Following the Photophysical Deactivation Pathways"
J. Phys. Chem. C **2009**, *113*, 19292-19297. CLAVE: A
161. J.L. Rodríguez-Redondo, R.D. Costa, E. Ortí, A. Sastre-Santos, H.J. Bolink, F. Fernández-Lázaro
 "Red-Light-Emitting Electrochemical Cell Using a Polypyridyl Iridium(III) Polymer"
Dalton Trans. **2009**, 9787-9793. CLAVE: A
162. R.D. Costa, E. Ortí, H.J. Bolink, S. Graber, S. Schaffner, M. Neuburger, C.E. Housecroft, E.C. Constable
 "Archetype Cationic Iridium Complexes and Their Use in Solid-State Light-Emitting Electrochemical Cells"
Adv. Funct. Mater. **2009**, *19*, 3456-3463. CLAVE: A
163. R. Malavé Osuna, V. Hernández, J.T. López Navarrete, J. Aragón, P.M. Viruela, E. Ortí, Y. Suzuki, S. Yamaguchi, J.T. Henssler, A.J. Matzger

- "FT Raman and DFT Study on a Series of All-anti Oligothienoacenes End-Capped with Triisopropylsilyl Groups"
ChemPhysChem **2009**, *10*, 3069-3076. CLAVE: A
164. M.D. Gómez-Jiménez, R. Pou-Amérigo, E. Ortí
"A Theoretical Study of the Low-Lying Excited States of Thieno[3,4-*b*]pyrazine"
J. Chem. Phys. **2009**, *131*, 244105(1-8). CLAVE: A
165. R. Ponce, J. Casado, S. Rodríguez, V. Hernández, J.T. López-Navarrete, P.M. Viruela, E. Ortí, K. Takimiya, T. Otsubo
"Quinoidal Oligothiophenes: Towards Biradical Ground-State Species"
Chem. Eur. J. **2010**, *16*, 470-484. CLAVE: A
166. H. Isla, M. Gallego, E.M. Pérez, R. Viruela, E. Ortí, N. Martín
"A Bis-exTTF Macrocyclic Receptor that Associates C₆₀ with Micromolar Affinity"
J. Am. Chem. Soc. **2010**, *132*, 1772-1773. CLAVE: A
167. R.D. Costa, A. Pertegás, E. Ortí, H.J. Bolink
"Improving the Turn-On Time of Light-Emitting Electrochemical Cells without Sacrificing their Stability"
Chem. Mater. **2010**, *22*, 1288-1290. CLAVE: A
168. R.D. Costa, E. Ortí, H.J. Bolink, S. Graber, C.E. Housecroft, E.C. Constable
"Efficient and Long-Living Light-Emitting Electrochemical Cells"
Adv. Funct. Mater. **2010**, *20*, 1511-1520. CLAVE: A
169. R.D. Costa, E. Ortí, H.J. Bolink, S. Graber, C.E. Housecroft, E.C. Constable
"Intramolecular π -Stacking in a Phenylpyrazole-Based Iridium Complex and Its Use in Light-Emitting Electrochemical Cells"
J. Am. Chem. Soc. **2010**, *132*, 5978-5980. CLAVE: A
170. J. Aragó, P.M. Viruela, E. Ortí, R. Malavé, B. Vercelli, G. Zotti, V. Henández, J.T. López-Navarrete, J.T. Henssler, A.J. Matzger, Y. Suzuki, S. Yamaguchi
"Neutral and Oxidized Triisopropylsilyl End-Capped Oligothienoacenes: A Combined Electrochemical, Spectroscopic, and Theoretical Study"
Chem. Eur. J. **2010**, *16*, 5481-5491. CLAVE: A
171. R.D. Costa, H.J. Bolink, E. Ortí, S. Graber, M. Neuburger, C.E. Housecroft, E.C. Constable
"Long-Living Emitting Electrochemical Cells Based on Supramolecular π - π Interactions"
in "Organic Materials for Printable Thin-Film Electronic Devices"
Eds: M.L. Chabynic, D. Gundlach, J. Nelson, T. Someya
Mater. Res. Soc. Symp. Proc., Vol. 1197E, Warrendale, PA, **2010**, 1197-D04-32. CLAVE: A
172. R.D. Costa, A. Pertegás, D. Tordera, M. Lenes, E. Ortí, H.J. Bolink, S. Graber, E.C. Constable, C.E. Housecroft
"Stable and Efficient Light-Emitting Electrochemical Cells"
in "Nanotechnology 2010: Electronics, Devices, Fabrications, MEMS, Fluidics and Computational"
NSTI-Nanotech 2010, ISBN 978-1-4398-3402-2, Vol.2, **2010**, 49-52. CLAVE: A
173. R.D. Costa, G. Fernández, L. Sánchez, N. Martín, E. Ortí, H.J. Bolink
"Dumbbell-Shaped Dinuclear Iridium Complexes and Their Application to Light-Emitting Electrochemical Cells"
Chem. Eur. J. **2010**, *16*, 9855-9863. CLAVE: A
174. J. Pitarch, M.P. Clares, R. Belda, R.D. Costa, P. Navarro, E. Ortí, C. Soriano, E. García-España
"Zn(II)-Coordination and Fluorescence Studies of a New Polyazamacrocyclic Incorporating 1*H*-Pyrazole and Naphthalene Units"
Dalton Trans. **2010**, *39*, 7741-7746. CLAVE: A
175. J. Aragó, P.M. Viruela, J. Gierschner, E. Ortí, B. Milián-Medina
"Oligothienoacenes versus Oligothiophenes: Impact of Ring Fusion on the Optical Properties"

- Phys. Chem. Chem. Phys.* **2011**, *13*, 1457-1465. CLAVE: A
176. J. Santos, B.M. Illescas, N. Martín, J. Adrio, J.C. Carretero, R. Viruela, E. Ortí, F. Spänig, D.M. Guldi
 "A Fully Conjugated TTF- π -TCAQ System: Synthesis, Structure, and Electronic Properties"
Chem. Eur. J. **2011**, *17*, 2957-2964. CLAVE: A
177. P.-A. Bouilt, C. Villegas, J.L. Delgado, P.M. Viruela, R. Pou-Amérigo, E. Ortí, N. Martín
 "ExtTTF-Based Dyes Absorbing over the Whole Visible Spectrum"
Org. Lett. **2011**, *13*, 604-607. CLAVE: A
178. R.D. Costa, E. Ortí, H.J. Bolink, S. Graber, C.E. Housecroft, E.C. Constable
 "Light-Emitting Electrochemical Cells Based on a Supramolecularly-Caged Phenanthroline-Based Iridium Complex"
Chem. Commun. **2011**, *47*, 3207-3209. CLAVE: A
179. J. Aragón, P.M. Viruela, E. Ortí, R. Malavé-Osuna, V. Hernández, J.T. López-Navarrete, C.R. Swartz, J.E. Anthony
 "Functionalized Pentacenes: A Combined Theoretical, Raman and UV-Vis Spectroscopic Study"
Theor. Chem. Acc. **2011**, *128*, 521-530. CLAVE: A
180. R.D. Costa, E. Ortí, D. Tordera, A. Pertegás, H.J. Bolink, S. Graber, C.E. Housecroft, L. Sachno, M. Neuburger, E.C. Constable
 "Stable and Efficient Solid-State Light-Emitting Electrochemical Cells Based on a Series of Hydrophobic Iridium Complexes"
Adv. Energy Mater. **2011**, *1*, 282-290. CLAVE: A
181. F. García, P.M. Viruela, E. Matesanz, E. Ortí, L. Sánchez
 "Cooperative Supramolecular Polymerization and Amplification of Chirality in C₃-Symmetrical OPE-Based Trisamides"
Chem. Eur. J. **2011**, *17*, 7755-7759. CLAVE: A
182. J. Aragón, J.C. Sancho-García, E. Ortí, D. Beljonne
 "Ab Initio Modeling of Donor-Acceptor Interactions and Charge-Transfer Excitations in Molecular Complexes: The Case of Terthiophene-Tetracyanoquinodimethane"
J. Chem. Theory Comput. **2011**, *7*, 2068-2077. CLAVE: A
183. R.D. Costa, F. Monti, G. Accorsi, A. Barbieri, H.J. Bolink, E. Ortí, N. Armaroli
 "Photophysical Properties of Charged Cyclometalated Ir(III) Complexes: A Joint Theoretical and Experimental Study"
Inorg. Chem. **2011**, *50*, 7229-7238. CLAVE: A
184. R.D. Costa, D. Tordera, E. Ortí, H.J. Bolink, J. Schönle, S. Graber, C.E. Housecroft, E.C. Constable, J.A. Zampese
 "Copper(I) Complexes for Sustainable Light-Emitting Electrochemical Cells"
J. Mater. Chem. **2011**, *21*, 16108-16118. CLAVE: A
185. B. Milián-Medina, S. Varghese, R. Ragni, H. Boerner, E. Ortí, G.M. Farinola, J. Gierschner
 "Excited-State Switching by per-Fluorination of para-Oligophenylenes"
J. Chem. Phys. **2011**, *135*, 124509 (1-6). CLAVE: A
186. R.D. Costa, E. Ortí, H.J. Bolink
 "Recent Advances in Light-Emitting Electrochemical Cells"
Pure Appl. Chem. **2011**, *83*, 2115-2128. CLAVE: A
187. S. Rodríguez González, J. Aragón, P.M. Viruela, E. Ortí, J.T. López Navarrete, M. Sato, J. Casado
 "Diferrocenyl Oligothiophene Wires: Raman and Quantum Chemical Study of Valence-Trapped Cations"
J. Chem. Phys. **2011**, *135*, 234705 (1-5). CLAVE: A
188. F. Kessler, R.D. Costa, D. Di Censo, R. Scopelliti, E. Ortí, H.J. Bolink, S. Meier, W. Sarfert, M. Grätzel, Md.K. Nazeeruddin, E. Baranoff
 "Near-UV to Red-Emitting Charged bis-Cyclometallated Iridium(III) Complexes for Light-Emitting Electrochemical Cells"

- Dalton Trans.* **2012**, *41*, 180-191. CLAVE: A
189. H. Isla, B. Grimm, E.M. Pérez, M.R. Torres, M.A. Herranz, R. Viruela, J. Aragón, E. Ortí, D. Guldi, N. Martín
 "Bowl-Shape Electron Donors with Absorptions in the Visible Range of the Solar Spectrum and their Supramolecular Assemblies with C₆₀"
Chem. Sci. **2012**, *3*, 498-508. CLAVE: A
190. J. Aragón, R. Ponce Ortiz, B. Nieto Ortega, V. Hernández, J. Casado, A. Facchetti, T.J. Marks, P.M. Viruela, E.Ortí, J.T. López Navarrete
 "Carbonyl-Functionalized Quaterthiophenes: A Study of the Vibrational Raman and Electronic Absorption/Emission Properties Guided by Theoretical Calculations"
ChemPhysChem. **2012**, *13*, 168-176. CLAVE: A
191. D. Tordera, S. Meier, M. Lenes, R.D. Costa, E.Ortí, W. Sarfert, H.J. Bolink
 "Simple, Fast, Bright, and Stable Light Sources"
Adv. Mater. **2012**, *24*, 897-900. CLAVE: A
192. N.M. Shavaleev, F. Monti, R.D. Costa, R. Scopelliti, H.J. Bolink, E.Ortí, G. Accorsi, N. Armaroli, E. Baranoff, M. Grätzel, Md.K. Nazeeruddin
 "Bright Blue Phosphorescence from Cationic Bis-Cyclometalated Iridium(III) Isocyanide Complexes"
Inorg. Chem. **2012**, *51*, 2263-2271. CLAVE: A
193. D. Tordera, M. Delgado, E. Ortí, H.J. Bolink, J. Frey, Md.K. Nazeeruddin, E. Baranoff
 "Stable Green Electroluminescence from an Iridium Tris-Heteroleptic Ionic Complex"
Chem. Mater. **2012**, *24*, 1896-1903. CLAVE: A
194. P.A. Bouit, M. Marszalek, R. Humphry-Baker, R. Viruela, E. Ortí, S.M. Zakeeruddin, M. Grätzel, J.L. Delgado, N. Martín
 "Donor- π -Acceptors Containing the 10-(1,3-Dithiol-2-ylidene)anthracene Unit for Dye-Sensitized Solar Cells"
Chem. Eur. J. **2012**, *18*, 11621-11629. CLAVE: A
195. R.D. Costa, E. Ortí, H.J. Bolink, F. Monti, G. Accorsi, N. Armaroli
 "Luminescent Ionic Transition-Metal Complexes for Light-Emitting Electrochemical Cells"
Angew. Chem. Int. Ed. **2012**, *51*, 8178-8211 (review). CLAVE: A
196. A.M. Bünzli, H.J. Bolink, E.C. Constable, C.E. Housecroft, M. Neuburger, E. Ortí, A. Pertegás, J.A. Zampese
 "Fine-Tuning of Photophysical and Electronic Properties of Materials for Photonic Devices Through Remote Functionalization"
Eur. J. Inorg. Chem. **2012**, 3780-3788. CLAVE: A
197. D. Tordera, A. Pertegás, N.M. Shavaleev, R. Scopelliti, E. Ortí, H.J. Bolink, E. Baranoff, M. Grätzel, Md.K. Nazeeruddin
 "Efficient Orange Light-emitting Electrochemical Cells"
J. Mater. Chem. **2012**, *22*, 19264-19268. CLAVE: A
198. R. García, M.A. Herranz, M.R. Torres, P.-A. Bouit, J.L. Delgado, J. Calbo, P.M. Viruela, E. Ortí, N. Martín
 "Tuning the Electronic Properties of Non-Planar exTTF-Based Push-Pull Chromophores by Aryl-Substitution"
J. Org. Chem. **2012**, *77*, 10707-10717. CLAVE: A
199. E. Baranoff, H.J. Bolink, E.C. Constable, M. Delgado, D. Häussinger, C.E. Housecroft, Md.K. Nazeeruddin, M. Neuburger, E. Ortí, G.E. Schneider, D. Tordera, R.M. Walliser, J.A. Zampese
 "Tuning the Photophysical Properties of Cationic Iridium(III) Complexes Containing Cyclometallated 1-(2,4-Difluorophenyl)-1*H*-Pyrazole through Functionalized 2,2'-Bipyridine Ligands: Blue but not Blue Enough"
Dalton Trans. **2013**, *42*, 1073-1087. CLAVE: A
200. S.B. Meier, W. Sarfert, J.M. Junquera-Hernández, M. Delgado, D.Tordera, E. Ortí, H.J. Bolink, F. Kessler, R. Scopelliti, M. Grätzel, Md.K. Nazeeruddin, E. Baranoff
 "A Deep-Blue Emitting Charged Bis-Cyclometallated Iridium(III) Complex for Light-Emitting Electrochemical Cells"

- J. Mater. Chem. C* **2013**, *1*, 58-68. CLAVE: A
201. E.C. Constable, M. Neuburger, P. Rösel, G.E. Schneider, J.A. Zampese, C.E. Housecroft, F. Monti, N. Armaroli, R.D. Costa, E. Ortí
 "Ligand-Based Charge-Transfer Luminescence in Ionic Cyclometalated Iridium(III) Complexes Bearing a Pyrene-Functionalized Bipyridine Ligand: A Joint Theoretical and Experimental Study"
Inorg. Chem. **2013**, *52*, 885-897. CLAVE: A
202. F. García, J. Aragón, R. Viruela, E. Ortí, L. Sánchez
 "A Bis(triazole)benzamide Receptor for the Complexation of Halide Anions and Neutral Carboxylic Acid Guests. Guest-Controlled Topicity and Self-Assembly"
Org. Biol. Chem. **2013**, *11*, 765-772. CLAVE: A
203. R.D. Costa, J. Aragón, E. Ortí, T.M. Pappenfus, K.R. Mann, K. Matczyszyn, M. Samoc, J.L. Zafra, J.T. López Navarrete, J. Casado
 "Impact of the Synergistic Collaboration of Oligothiophene Bridges and Ruthenium Complexes on the Optical Properties of Dumbbell-Shaped Compounds"
Chem. Eur. J. **2013**, *19*, 1476-1488. CLAVE: A
204. J. Calbo, J. Aragón, E. Ortí
 "Theoretical Study of the Benzoquinone–Tetrathiafulvalene–Benzoquinone Triad in Neutral and Oxidized/Reduced States"
Theor. Chem. Acc. **2013**, *132*, 1330 (1-10). CLAVE: A
205. J.C. Sancho-García, J. Aragón, E. Ortí, Y. Olivier
 "Obtaining the Lattice Energy of the Anthracene Crystal by Modern yet Affordable First-Principles Methods"
J. Chem. Phys. **2013**, *138*, 204304 (1-8). CLAVE: A
206. D. Tordera, A.M. Bünzli, A. Pertegás, J.M. Junquera-Hernández, E.C. Constable, J.A. Zampese, C.E. Housecroft, E. Ortí, H.J. Bolink
 "Efficient Green-Light-Emitting Electrochemical Cells Based on Ionic Iridium Complexes with Sulfone-Containing Cyclometalating Ligands"
Chem. Eur. J. **2013**, *19*, 8597-8609. CLAVE: A
207. F.G. Brunetti, H. Isla, J. Aragón, E. Ortí, E.M. Pérez, N. Martín
 "Exploiting Multivalent Nanoparticles for the Supramolecular Functionalization of Graphene with a Nonplanar Recognition Motif"
Chem. Eur. J. **2013**, *19*, 9843-9848. CLAVE: A
208. J. Aragón, E. Ortí, J.C. Sancho-García
 "Nonlocal van der Waals Approach Merged with Double-Hybrid Density Functionals: Toward the Accurate Treatment of Noncovalent Interactions"
J. Chem. Theory Comput. **2013**, *9*, 3437–3443. CLAVE: A
209. P.-A. Bouit, L. Infantes, J. Calbo, R. Viruela, E. Ortí, J.L. Delgado, N. Martín
 "Efficient Light Harvesters Based on the 10-(1,3-Dithiol-2-ylidene)anthracene Core"
Org. Lett. **2013**, *15*, 4166–4169. CLAVE: A
210. D. Tordera, J.J. Serrano-Pérez, A. Pertegás, E. Ortí, H.J. Bolink, E. Baranoff, Md.K. Nazeeruddin, J. Frey
 "Correlating the Lifetime and Fluorine Content of Iridium(III) Emitters in Green Light-Emitting Electrochemical Cells"
Chem. Mater. **2013**, *25*, 3391–3397. CLAVE: A
211. F. Monti, F. Kessler, M. Delgado, J. Frey, F. Bazzanini, G. Accorsi, N. Armaroli, H.J. Bolink, E. Ortí, R. Scopelliti, Md.K. Nazeeruddin, E. Baranoff
 "Charged Bis-Cyclometalated Iridium(III) Complexes with Carbene-Based Ancillary Ligands"
Inorg. Chem. **2013**, *52*, 10292–10305. CLAVE: A

212. D. Tordera, J. Frey, D. Vonlanthen, E.C. Constable, A. Pertegás, E. Ortí, H.J. Bolink, E. Baranoff, Md.K. Nazeeruddin
 “Low Current Density Driving Leads to Efficient, Bright and Stable Green Electroluminescence”
Adv. Energy Mater. **2013**, 3, 1338-1343. CLAVE: A
213. D. Tordera, A. Pertegás, E. Ortí, H.J. Bolink
 “Increasing the Efficiency of Light-Emitting Electrochemical Cells by Limiting the Exciton Quenching”
MRS Proceedings **2013**, 1567. CLAVE: A
214. P. Dreyse, B. Loeb, M. Soto-Arriaza, D. Tordera, E. Ortí, J.J. Serrano-Pérez, H.J. Bolink
 “Effect of Free Rotation in Polypyridinic Ligands of Ru(II) Complexes Applied in Light-Emitting Electrochemical Cells”
Dalton Trans. **2013**, 42, 15502-15513. CLAVE: A
215. J. Calbo, J. Aragón, F. Otón, V. Lloveras, M. Mas-Torrent, J. Vidal-Gancedo, J. Veciana, C. Rovira, E. Ortí
 “Tetrathiafulvalene-Based Mixed-Valence Acceptor-Donor-Acceptor Triads: A Joint Theoretical and Experimental Approach”
Chem. Eur. J. **2013**, 19, 16656-16664. CLAVE: A
216. A. Pertegás, D. Tordera, J.J. Serrano-Pérez, E. Ortí, H.J. Bolink
 “Light-Emitting Electrochemical Cells Using Cyanine Dyes as the Active Components”
J. Am. Chem. Soc. **2013**, 135, 18008-18011. CLAVE: A
217. A.M. Bünzli, H.J. Bolink, E.C. Constable, C.E. Housecroft, J.M. Junquera-Hernández, M. Neuburger, E. Ortí, A. Pertegás, J.J. Serrano-Pérez, D. Tordera, J.A. Zampese
 “Thienylpyridine-Based Cyclometallated Iridium(III) Complexes and Their Use in Solid State Light-Emitting Electrochemical Cells”
Dalton Trans. **2014**, 43, 738-750. CLAVE: A
218. T. Akatsuka, C. Roldán-Carmona, E. Ortí, H.J. Bolink
 “Dynamically Doped White Light Emitting Tandem Devices”
Adv. Mater. **2014**, 26, 770-774. CLAVE: A
219. A. Pertegás, N.M. Shavaleev, D. Tordera, E. Ortí, M. K. Nazeeruddin, H.J. Bolink
 “Host-guest blue light-emitting electrochemical cells”
J. Mater. Chem. C. **2014**, 2, 1605-1611. CLAVE: A
220. M. Gallego, J. Calbo, J. Aragón, R.M. Krick Calderon, F.H. Liquido, T. Iwamoto, A.K. Greene, E.A. Jackson, E.M. Pérez, E. Ortí, D.M. Guldi,* L.T. Scott, N. Martín
 “Electron Transfer in a Supramolecular Associate of a Fullerene Fragment”
Angew. Chem. Int. Ed. **2014**, 53, 2170-2175. CLAVE: A
221. J. Calbo, M. Pastore, E. Mosconi, E. Ortí, F. De Angelis
 “Computational Modeling of Single- versus Double-Anchoring Modes in Di-branched Organic Sensitizers on TiO₂ Surfaces: Structural and Electronic Properties”
Phys. Chem. Chem. Phys. **2014**, 16, 4709-4719. CLAVE: A
222. S. Meier, D. Tordera, C. Roldán, E. Ortí, H.J. Bolink
 “Light-Emitting Electrochemical Cells: Recent Progress and Future Prospects”
Mater. Today **2014**, in press (review). CLAVE: A
223. J. Calbo, J.M. Viruela, E. Ortí
 “Theoretical Insight on Novel Donor-Acceptor exTTF-Based Dyes for Dye-Sensitized Solar Cells”
J. Mol. Model. **2014**, submitted. CLAVE: A
224. F. García, R.D. Costa, J. Aragón, H.J. Bolink, E. Ortí, L. Sánchez
 “Tuning the Self-Assembly of Rectangular Amphiphilic Cruciforms”
Langmuir **2014**, submitted. CLAVE: A

225. O. Varnavski, N. Abeyasinghe, J. Aragón, J.J. Serrano-Pérez, E. Ortí, J.T. López Navarrete, K. Takimiya, D. Casanova, J. Casado, T. Goodson
“High Yield Ultrafast Intramolecular Singlet Exciton Fission in a Quinoidal Bithiophene”
J. Am. Chem. Soc. **2014**, submitted.

CLAVE: A

Participación en contratos de I+D de especial relevancia con Empresas y/o Administraciones

Título del contrato/proyecto: *Quantum Chemistry of the Excited State*

Tipo de contrato:

Empresa/Administración financiadora: Comisión Europea, Programa TMR (Training and Mobility of Researchers)

Entidades participantes: Los laboratorios integrantes de esta Red Europea son siete y proceden de Lund (Suecia, Coordinador de la red: Dr. B.O. Roos), Toulouse (Francia, Dr. J.P. Malrieu), Leuven (Bélgica, Dr. K. Pierloot), Valencia (España, Dr. M. Merchán), Tarragona (España, Dr. R. Caballol), Londres (Inglaterra, Dr. M. Robb) y Dresden (Alemania, Dr. P. Fulde).

Duración, desde: 1-Julio-1996 hasta: 31-Mayo-2000

Investigador responsable: Dr. B.O. Roos

Número de investigadores participantes: Univ. de València: 8

Presupuesto Total del Proyecto: Univ. de València: 28.202.000 pts

Título del contrato/proyecto: *Nanociencia Molecular*

Empresa/Administración financiadora: MEC (ref.: CSD2007-00010, Programa CONSOLIDER-INGENIO)

Entidades participantes: Universitat de València (Instituto de Ciencia Molecular), Universidad Complutense de Madrid (Grupo de Materiales Moleculares Orgánicos e Instituto de Magnetismo Aplicado), Universidad Autónoma de Madrid (Grupo de Ftalocianinas y Materiales Moleculares, Laboratorio de Superficies y Grupo de Bajas Temperaturas), CSIC-Madrid (Grupo de Biología Estructural y Biofísica Molecular), CSIC-Zaragoza (Grupo de Termomagnetismo) y Universidad de Alicante (Grupo de la Materia Condensada)

Duración, desde: Nov. 2007 hasta: Nov. 2013 Cuantía de la subvención: 5.750.000,00 euros

Investigador responsable: Dr. E. Coronado Miralles (Coordinador del Programa e Inv. Responsable por la Univ. Valencia)

Número de investigadores participantes: > 150

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Patentes y Modelos de utilidad

Título: Thin Film Electroluminescent Devices Driving Method

Tipo de propiedad industrial: Patente de invención

Inventores (p.o. de firma): H.J. Bolink, R.D. Costa, E. Ortí

Referencia: EP 09382268.2

Entidad titular: 2735 - Universitat de Valencia

País de prioridad: España

Fecha de prioridad: 29 Enero 2010

Título: Architecture of LECs

Tipo de propiedad industrial: Patente de invención

Inventores (p.o. de firma): E. Baranoff, J. Bauer, H.J. Bolink, E. Constable, M. Delgado, D. Hartmann, S. Meier, M.K. Nazeeruddin, E. Ortí, A. Pertegas, W. Sarfert, N.M. Shavaleev, D. Tordera, F. Vollkommer, D. Vonlanthen

Referencia: EP 12193255.2

Entidad titular: 5723 - ECOLE POLYTECHNIQUE FEDERALE DE LAUSANNE (EPFL)

País de prioridad: Alemania

Fecha: 2012

Empresas: 2735 - Universidad de Valencia / 3556 - Osram opto semiconductors (Alemania) / UBAS - Universität Basel. (Suiza)

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Estancias en Centros extranjeros
(estancias continuadas superiores a un mes)

CLAVE: D = doctorado, P = postdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras (especificar).

Centro:	Laboratoire de Chimie Théorique Appliquée, Facultés Universitaires Notre-Dame de la Paix.			
Localidad:	Namur	País: Bélgica	Fecha: 1987	Duración (semanas): 52
Tema:	<i>Compuestos orgánicos conductores de la electricidad: Ftalocianinas</i>			
Clave:	P			
Centro:	Service de Chimie des Matériaux Nouveaux, Université de Mons-Hainaut			
Localidad:	Mons	País: Bélgica	Fecha: 1988	Duración (semanas): 13
Tema:	<i>Propiedades electrónicas y ópticas de dímeros de ftalocianina</i>			
Clave:	I			
Centro:	Service de Chimie des Matériaux Nouveaux, Université de Mons-Hainaut			
Localidad:	Mons	País: Bélgica	Fecha: 1989	Duración (semanas): 4
Tema:	<i>Estructura electrónica de compuestos derivados de la ftalocianina</i>			
Clave:	I			
Centro:	Service de Chimie des Matériaux Nouveaux, Université de Mons-Hainaut			
Localidad:	Mons	País: Bélgica	Fecha: 1990	Duración (semanas): 4
Tema:	<i>Caracterización electrónica de la interfase polietilentereftalato/Cobre</i>			
Clave:	I			
Centro:	Service de Chimie des Matériaux Nouveaux, Université de Mons-Hainaut			
Localidad:	Mons	País: Bélgica	Fecha: 1993	Duración (semanas): 4
Tema:	<i>Estructura electrónica de análogos asimétricos de la ftalocianina</i>			
Clave:	I			
Centro:	Service de Chimie des Matériaux Nouveaux, Université de Mons-Hainaut			
Localidad:	Mons	País: Bélgica	Fecha: 1998	Duración (semanas): 13
Tema:	<i>Deslocalización de carga en la estructura de doble hélice del DNA</i>			
Clave:	I			

Contribuciones a Congresos

Conferencias Invitadas

- Autores: E. Ortí
Título: *Theoretical Approach to the Electronic Structure of Phtalocyanine: from the Molecule to the Crystal*
Tipo de Participación: Conferencia invitada
Congreso: International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals (ICSM'88)
Lugar de celebración: Santa Fe (USA) Fecha: 1988
- Autores: E. Ortí
Título: *Determinación Teórica de las Propiedades Electrónicas y Ópticas de Materiales Moleculares*
Tipo de Participación: Conferencia invitada
Congreso: I Escuela Nacional de Materiales Moleculares.
Lugar de celebración: Peñíscola (España) Fecha: 1992
- Autores: E. Ortí
Título: *Ftalocianinas: Ejemplos de Materiales Optoelectrónicamente Activos*
Tipo de Participación: Conferencia invitada
Congreso: I Escuela Nacional de Materiales Moleculares.
Lugar de celebración: Peñíscola (España) Fecha: 1992
- Autores: E. Ortí
Título: *Electronic Structure of Polysilanes: Influence of Substitution and Conformation*
Tipo de Participación: Conferencia Invitada
Congreso: International Conference on Science and Technology of Synthetic Metals (ICSM'92)
Lugar de celebración: Göteborg (Suecia) Fecha: 1992
- Autores: E. Ortí
Título: *Análogos de Ftalocianinas: Modulación Estructural de las Propiedades Electrónicas*
Tipo de Participación: Conferencia invitada
Congreso: Simposio sobre Nuevos Materiales Orgánicos
Lugar de celebración: Madrid (España) Fecha: 1994
- Autores: E. Ortí
Título: *Estructura Electrónica de Polímeros Conductores de la Electricidad. Determinación Teórica y Evolución con el Proceso de Dopado*
Tipo de Participación: Conferencia invitada
Congreso: II Escuela Nacional de Materiales Moleculares.
Lugar de celebración: Rialp (España) Fecha: 1994
- Autores: E. Ortí
Título: *Las Ftalocianinas como Materiales Ópticamente Activos*
Tipo de Participación: Conferencia invitada
Congreso: II Escuela Nacional de Materiales Moleculares.
Lugar de celebración: Rialp (España) Fecha: 1994
- Autores: E. Ortí
Título: *Teoría de la Conductividad en Polímeros Orgánicos*
Tipo de Participación: Conferencia invitada
Congreso: III Escuela Nacional de Materiales Moleculares
Lugar de celebración: Jaca (España) Fecha: 1996
- Autores: E. Ortí

Título: *π -Extended Molecular Electron Donors and Electron Acceptors. Theoretical Characterization*
 Tipo de Participación: Conferencia invitada
 Congreso: Spanish-French Workshop on "Magnetism and Molecular Electronics"
 Lugar de celebración: Valencia (España) Fecha: 1997

Autores: E. Ortí
 Título: *Modification of the Acceptor Properties of C₆₀: Theoretical Approach*
 Tipo de Participación: Conferencia invitada
 Congreso: Seminarios Internacionales Complutense ("Presente y Futuro de los Fullerenos: una Nueva Rama de la Química")
 Lugar de celebración: Madrid (España) Fecha: 1998

Autores: E. Ortí
 Título: *Moléculas Precursoras de Sistemas Conductores: Relación entre la Estructura Molecular y la Estructura Electrónica*
 Tipo de Participación: Conferencia invitada
 Congreso: IV Escuela Nacional de Materiales Moleculares
 Lugar de celebración: San Lorenzo del Escorial (España) Fecha: 1999

Autores: E. Ortí
 Título: *Moléculas Precursoras de Sistemas Conductores: Relación entre la Estructura Molecular y las Propiedades Electroquímicas*
 Tipo de Participación: Conferencia invitada
 Congreso: XXII Reunión del Grupo Especializado de Electroquímica de la RSEQ
 Lugar de celebración: San Sebastián (España) Fecha: 2000

Autores: E. Ortí
 Título: *Química Orgánica Computacional: Aproximación Cuántica a la Química Orgánica*
 Tipo de Participación: Conferencia invitada
 Congreso: Curso de Verano Univ. de Castilla-La Mancha ("Química Orgánica: Una Herramienta de la Sociedad del Bienestar")
 Lugar de celebración: Toledo (España) Fecha: 2000

Autores: E. Ortí
 Título: *Polyconjugated Molecules as Building-blocks for Organic Electroactive Materials*
 Tipo de Participación: Conferencia invitada
 Congreso: Simposio Internacional Fundación Ramón Areces: "Modelling of Molecules and Biomolecules: State of the Art and Perspectives"
 Lugar de celebración: Madrid (España) Fecha: 27-28 Nov. 2001

Autores: E. Ortí
 Título: *Jugando con los Electrones en las Moléculas: La Nueva Electrónica Molecular*
 Tipo de Participación: Conferencia invitada
 Congreso: VII Ciclo de Conferencias "¿Por Dónde va la Ciencia?". Fundación Caja Castellón-Bancaja
 Lugar de celebración: Castellón (España) Fecha: 3 Abril 2003

Autores: E. Ortí
 Título: *Sistemas Policonjugados: Estructura Molecular, Estructura Electrónica y Propiedades Redox*
 Tipo de Participación: Conferencia invitada
 Congreso: VI Escuela Nacional de Materiales Moleculares
 Lugar de celebración: La Azohía (Murcia-España) Fecha: 21-29 Junio 2003

Autores: E. Ortí
 Título: *Introducción a la Electrónica Molecular*
 Tipo de Participación: Conferencia invitada

Congreso: Nanociencia y Nanotecnología (Univ. Internacional Menéndez Pelayo, UIMP)
 Lugar de celebración: Valencia (España) Fecha: 13-17 Octubre 2003

Autores: E. Ortí
 Título: *Dispositivos Electroluminiscentes*
 Tipo de Participación: Conferencia invitada
 Congreso: VII Iberic Meeting of Electrochemistry y XXVI Reunión Bienal del Grupo de Electroquímica de la RSEQ
 Lugar de celebración: Córdoba (España) Fecha: 12-15 Abril 2004

Autores: M.D. Gómez, P.M. Viruela y E. Ortí
 Título: *Oligothiophenes as Ambipolar Semiconductors for Organic TFTs. Quinoid versus Aromatic Systems*
 Tipo de Participación: Conferencia
 Congreso: 1ª Reunión sobre Dispositivos Orgánicos Fotovoltaicos, Electro-Ópticos y Electrónicos
 Lugar de celebración: Benicassim (España) Fecha: 14-16 Septiembre 2005

Autores: E. Ortí
 Título: *Cálculo Teórico de Propiedades Moleculares*
 Tipo de Participación: Conferencia
 Congreso: VIII Escuela Nacional de Materiales Moleculares
 Lugar de celebración: Estepona (España) Fecha: 20-27 Mayo 2007

Autores: E. Ortí
 Título: *Cálculo Teórico de Sistemas Moleculares Electroactivos*
 Tipo de Participación: Conferencia
 Congreso: IX Escuela Nacional de Materiales Moleculares
 Lugar de celebración: Peñíscola (España) Fecha: 17-22 Febrero 2008

Autores: E. Ortí
 Título: *Excited States of Ru(II) and Ir(III) Cationic Complexes and their Implications in Electroluminescent Devices*
 Tipo de Participación: Conferencia
 Congreso: Simposio Internacional: Twenty Years of Quantum Chemistry in Mons
 Lugar de celebración: Mons (Bélgica) Fecha: 26 Septiembre 2008

Autores: E. Ortí
 Título: *Sistemas Electroactivos para Electrónica Molecular. Aproximación Químico-Cuántica*
 Tipo de Participación: Conferencia
 Congreso: X Escuela Nacional de Materiales Moleculares
 Lugar de celebración: Elche (España) Fecha: 8-13 Febrero 2009

Autores: E. Ortí
 Título: *Diseño Teórico-Experimental de Sistemas Moleculares Electroactivos*
 Tipo de Participación: Conferencia
 Congreso: Simposium CONSOLIDER en Nanociencia Molecular
 Lugar de celebración: Miraflores de la Sierra (España) Fecha: 7-9 Junio 2009

Autores: E. Ortí
 Título: *Sistemas Moleculares Electroactivos: Generando Luz y Energía con Moléculas*
 Tipo de Participación: Conferencia invitada
 Congreso: Curso de verano de la Universidad de Málaga: "La Revolución de la Nanociencia: Contribución a los Nuevos Materiales y la Biomedicina".
 Lugar de celebración: Ronda (España) Fecha: 13-17 Julio 2009

Autores: R.D. Costa, H.J. Bolink, E. Ortí

Título: *Electroluminiscencia a partir de Complejos Iónicos de Metales de Transición*
 Tipo de Participación: Comunicación Oral 15'
 Congreso: XXXII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
 Lugar de celebración: Oviedo (España) Fecha: 13-18 Septiembre 2009

Autores: E. Ortí
 Título: *Quinoidal Oligothiophenes: Challenging Molecules with a Large Biradical Character*
 Tipo de Participación: Conferencia Invitada
 Congreso: 1st European Symposium on Computing π -Conjugated Compounds
 Lugar de celebración: Valencia (España) Fecha: 21-23 Enero 2010

Autores: E. Ortí
 Título: *Electroluminiscencia a partir de Complejos Iónicos de Metales de Transición*
 Tipo de Participación: Conferencia Invitada
 Congreso: XI Escuela Nacional de Materiales Moleculares
 Lugar de celebración: Peñafiel (España) Fecha: 14-19 Febrero 2010

Autores: E. Ortí
 Título: *Quinoidal Oligothiophenes: Challenging Molecules with Increasing Biradical Character*
 Tipo de Participación: Conferencia Invitada
 Congreso: III European School on Molecular Nanoscience
 Lugar de celebración: Miraflores de la Sierra (España) Fecha: 22-29 Octubre 2010

Autores: E. Ortí
 Título: *Sistemas Moleculares Electroluminiscentes: Modulación de la Estabilidad, el Color y la Eficiencia*
 Tipo de Participación: Conferencia Invitada
 Congreso: XII Escuela Nacional de Materiales Moleculares
 Lugar de celebración: Benicassim (España) Fecha: 6-11 Febrero 2011

Autores: E. Ortí
 Título: *Electrónica Molecular: Generando Luz y Energía con Moléculas*
 Tipo de Participación: Conferencia Invitada
 Congreso: II Jornadas sobre Biotecnología y Nanotecnología
 Lugar de celebración: Linares (España) Fecha: 17-20 Mayo 2011

Autores: E. Ortí
 Título: *Electroluminescence from ionic transition-metal complexes*
 Tipo de Participación: Conferencia Invitada
 Congreso: 9th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2011)
 Lugar de celebración: Santiago de Compostela (España) Fecha: 17-22 Julio 2011

Autores: E. Ortí
 Título: *Sistemas Electroluminiscentes Basados en Complejos Iónicos de Metales de Transición*
 Tipo de Participación: Conferencia Invitada
 Congreso: VIII Jornadas Científicas del Instituto Universitario de Materiales de Alicante
 Lugar de celebración: Alicante (España) Fecha: 19-20 Enero 2012

Autores: E. Ortí
 Título: *Electroluminescent Materials Based on Ionic Transition-Metal Complexes*
 Tipo de Participación: Conferencia Invitada
 Congreso: 8th International Congress on Chemistry, Chemical Engineering and Biochemistry
 Lugar de celebración: La Habana (Cuba) Fecha: 9-12 Octubre 2012

Autores: E. Ortí
 Título: *Orbitales Moleculares: ¿Qué Información nos Proporcionan?*

Tipo de Participación: Conferencia Invitada
Congreso: XIV Escuela Nacional de Materiales Moleculares
Lugar de celebración: Almagro (España) Fecha: 3-7 Febrero 2013

Autores: J. Calbo, E. Ortí, E. Mosconi, F. De Angelis
Título: *The Role of Donor-Acceptor Tweezers and their Anchoring Modes in Dye-Sensitized Solar Cells*
Tipo de Participación: Contributed Talk
Congreso: 9th European Conference on Computational Chemistry (EuCo-CC9)
Lugar de celebración: Sopron (Hungary) Fecha: 1-5 Septiembre 2013

Autores: E. Ortí
Título: *Células Electroquímicas Emisoras de Luz: Modulación Química del Color y la Eficiencia*
Tipo de Participación: Contributed Talk
Congreso: XXXIV Reunión Bienal de la RSEQ
Lugar de celebración: Santander (España) Fecha: 15-18 Septiembre 2013

Autores: E. Ortí
Título: *Sistemas Moleculares Electroactivos: Sistemas Dador-Aceptor y Sistemas Electroluminiscentes*
Tipo de Participación: Conferencia Invitada
Congreso: II Simposio Consolider en Nanociencia Molecular
Lugar de celebración: Cuenca (España) Fecha: 25-26 Octubre 2013

Autores: E. Ortí
Título: *Electroluminescent Materials for Light-Emitting Electrochemical Cells*
Tipo de Participación: Conferencia Invitada
Congreso: VI European School on Molecular Nanoscience
Lugar de celebración: Cuenca (España) Fecha: 27-31 Octubre 2013

Otros Seminarios y Conferencias

- Autores: E. Ortí
Título: *Organic Metals*
Lugar de Presentación: Service de Chimie des Matériaux Nouveaux, Univ. Mons-Hainaut (Bélgica)
Fecha: 1988
- Autores: E. Ortí
Título: *Determinación Teórica de las Propiedades Electrónicas de Moléculas Precursoras de Metales Orgánicos*
Lugar de Presentación: Dept. Química Orgánica, Univ. Complutense de Madrid (España)
Fecha: 1992
- Autores: E. Ortí
Título: *Phthalocyanines: Electronic and Geometric Structure*
Lugar de Presentación: Service de Chimie des Matériaux Nouveaux, Univ. Mons-Hainaut (Bélgica)
Fecha: 1993
- Autores: E. Ortí
Título: *Theoretical Study of the Electronic Spectra of Short Conjugated Oligomers: Biphenyl and its Radical Monoions*
Lugar de Presentación: Service de Chimie des Matériaux Nouveaux, Univ. Mons-Hainaut (Bélgica)
Fecha: 1995
- Autores: E. Ortí
Título: *Moléculas Precursoras de Sistemas Conductores: Relación entre la Estructura Molecular y las Propiedades Electrónicas*
Lugar de Presentación: Univ. Málaga (España)
Fecha: 2000
- Autores: E. Ortí
Título: *Moléculas Policonjugadas para la Obtención de Materiales Orgánicos Electroactivos*
Lugar de Presentación: Dept. Química Orgánica, Univ. Complutense de Madrid (España)
Fecha: 29-11-2001
- Autores: E. Ortí
Título: *Jugando con los Electrones en las Moléculas: La Nueva Electrónica Molecular*
Lugar de Presentación: Instituto de Ciencia Molecular, Univ. Valencia (España)
Fecha: 8-4-2003
- Autores: E. Ortí
Título: *Dispositivos Plásticos Electroluminiscentes: ¿Los Televisores del Futuro?*
Lugar de Presentación: Jornada de Inauguración del Centro de Electroquímica y Materiales Inteligentes (CEMI), Univ. Politécnica de Cartagena (España)
Fecha: 7-11-2003
- Autores: E. Ortí
Título: *Electrónica Molecular: La Alternativa de los Plásticos*
Lugar de Presentación: 2 Horas en el curso "Temas Actuales en Ciencia III" impartido en la Universitat de València dentro del programa "La Nau Gran" del Vicerrectorado de Extensión Universitaria y Relaciones con la Sociedad (España)
Fecha: 4-12-2003
- Autores: E. Ortí y H. Bolink
Título: *Electrónica Molecular: Generando Luz y Energía con Moléculas*

Lugar de Presentación: Facultad de Químicas, Universidad de Valencia (España)
Fecha: 22-4-2004

Autores: E. Ortí
Título: *Iluminación y Pantallas Planas: La Alternativa de los plásticos*
Lugar de Presentación: Universidad Politécnica de Cartagena, dentro del Ciclo de Conferencias "Avances Tecnológicos y Químico-Físicos Aplicados en la Sociedad"
Fecha: 2-12-2004

Autores: E. Ortí
Título: *Dispositivos Electroluminiscentes: Iluminación y Pantallas Planas*
Lugar de Presentación: 2 Horas en el curso "Temas Actuales en Ciencia IV" impartido en la Universitat de València dentro del programa "La Nau Gran" del Vicerrectorado de Extensión Universitaria y Relaciones con la Sociedad (España)
Fecha: 3-3-2005

Autores: E. Ortí
Título: *Electrónica Molecular: Generando Luz y Energía con Moléculas*
Lugar de Presentación: 7ª Setmana de la Ciència i la Tecnologia, Universidad de Valencia, IES Manuel Sanchis Guarner (Silla) y Centro Concertado N. Sra. del Socorro (Benetússer)
Fecha: 18 y 25-12-2005

Autores: E. Ortí
Título: *Electrónica Molecular: Generando Luz y Energía con Moléculas*
Lugar de Presentación: 8ª Setmana de la Ciència i la Tecnologia, Universidad de Valencia, IES Els Vols (L'Alcudia), IES Enric Valor (Silla) y IES José Segrelles (Albaida)
Fecha: 9, 16 y 23-11-2006

Autores: E. Ortí
Título: *Electrónica Molecular: Generando Luz y Energía con Moléculas*
Lugar de Presentación: 9ª Setmana de la Ciència i la Tecnologia, Universidad de Valencia, IES Pere d'Esplugues (La Pobla LLarga), IES Alameda (Utiel) y Centro Asunción de Nuestra Señora (Riba-roja de Túria)
Fecha: 16, 29 y 30-11-2007

Autores: E. Ortí
Título: *Sistemas Moleculares Electroactivos: Complejos Electroluminiscentes de Ru(II) e Ir(III)*
Lugar de Presentación: Dep. Química Orgánica, Universidad Complutense de Madrid
Fecha: 9-5-2008

Autores: E. Ortí
Título: *Electrónica Molecular: Generando Luz y Energía con Moléculas*
Lugar de Presentación: 10ª Setmana de la Ciència i la Tecnologia, Universidad de Valencia, IES Dr. Luis Simarro (Xàtiva), IES Carles Salvador (Aldaia) e IES Comarcal Rocafort-Godella-Burjassot (Burjassot)
Fecha: 21 y 28-11-2008 y 5-12-2008

Autores: E. Ortí
Título: *Diseño Teórico-Experimental de Sistemas Moleculares Electroluminiscentes*
Lugar de Presentación: Universidad Autónoma de Madrid, Depto. de Química Orgánica (dentro del ciclo: "Nanoscience and Molecular Materials")
Fecha: 22-06-2010

Autores: E. Ortí
Título: *Sistemas Moleculares Electroluminiscentes: Generando Luz con Moléculas*
Lugar de Presentación: Universidad de Valladolid, Facultad de Química (dentro del ciclo: "Perspectivas en Química")
Fecha: 15-10-2010

Autores: E. Ortí
 Título: *Electrónica Molecular: Generando Luz y Energía con Moléculas*
 Lugar de Presentación: 12ª Setmana de la Ciència i la Tecnologia, Universidad de Valencia, IES Misericordia 26 (Valencia)
 Fecha: 30-11-2010

Autores: E. Ortí
 Título: *Diseño Teórico-Experimental de Sistemas Moleculares Electroluminiscentes*
 Lugar de Presentación: Universidad Complutense de Madrid, Depto. de Química Física de la Facultad de Ciencias Químicas
 Fecha: 2-2-2011

Autores: E. Ortí
 Título: *Orbitales Moleculares y Transferencia de Carga*
 Lugar de Presentación: Universidad Complutense de Madrid, Depto. de Química Orgánica de la Facultad de Ciencias Químicas
 Fecha: 3-3-2011

Autores: E. Ortí
 Título: *Sistemas Moleculares Electroluminiscentes: De la Molécula al Dispositivo*
 Lugar de Presentación: Instituto de Nanociencia, Nanotecnología y Materiales Moleculares, Universidad de Castilla La Mancha (Campus de Toledo)
 Fecha: 20-5-2011

Autores: E. Ortí
 Título: *Sistemas Moleculares Electroluminiscentes: Modulación de la Estabilidad, el Color y la Eficiencia*
 Lugar de Presentación: Centro de Investigación en Química de la Universidad de Santiago (CIQUS), Santiago de Compostela.
 Fecha: 22-7-2011

Autores: E. Ortí
 Título: *Theoretical Calculations on Electroactive Molecular Systems*
 Lugar de Presentación: Instituto de Ciencia Molecular, Universidad de Valencia.
 Fecha: 20-09-2011

Autores: E. Ortí
 Título: *Cálculos teóricos en Electrónica Molecular*
 Lugar de Presentación: Facultad de Química, Universidad de Valencia.
 Fecha: 10-11-2011

Autores: E. Ortí
 Título: *Generando Luz con Moléculas: Sistemas Moleculares Electroluminiscentes*
 Lugar de Presentación: Ciclo de Conferencias "La Química: Una Ciencia, Infinitas Posibilidades" organizado por la Universidad de Málaga por el Año Internacional de la Química.
 Fecha: 15-11-2011

Autores: E. Ortí
 Título: *Electrónica Molecular: Generando Luz y Energía con Moléculas*
 Lugar de Presentación: Colegio San José de Calasanz, Valencia.
 Fecha: 18-11-2011

Autores: E. Ortí
 Título: *Electrónica Molecular: Generant Llum i Energia amb Molècules*
 Lugar de Presentación: 13ª Setmana de la Ciència i la Tecnologia, Universidad de Valencia, IES Enric Soler i Godes (Benifaió, Valencia)
 Fecha: 24-11-2011

Autores: E. Ortí
Título: *Materiales Electroluminiscentes Basados en Complejos Iónicos de Metales de Transición*
Lugar de Presentación: Ciclo de Conferencias: "La Química del Siglo XXI" de la Universidad de Granada (Granada)
Fecha: 1-6-2012

Autores: E. Ortí
Título: *Electrònica Molecular: Generant Llum i Energía amb Molècules*
Lugar de Presentación: 14ª Setmana de la Ciència i la Tecnologia, Universidad de Valencia, IES Joan Llopis (Cullera, Valencia)
Fecha: 15-11-2012

Mesas Redondas

Participantes: J. Bisquert (moderador), P. Gómez, E. Ortí, D. Navajas
Título: *De las Toneladas a los Nanometros. Cambios de Enfasis en el Diseño de Materiales*
Congreso: Nanociencia y Nanotecnología (Univ. Internacional Menéndez Pelayo, UIMP)
Lugar de celebración: Valencia (España) Fecha: 13-17 Octubre 2003

Paneles y Comunicaciones Orales

Autor de 196 comunicaciones, en forma de panel u orales, a congresos nacionales e internacionales.

Experiencia en organización de actividades de I+D

(Organización de congresos, seminarios, jornadas, etc., científicos-tecnológicos)

Título: *Sisena Reunió del Grup de Química Quàntica de l'Institut d'Estudis Catalans*

Tipo de actividad: Congreso (Secretario Comité Org.) Ambito: Nacional

Fecha: Junio 1990

Título: *La Ciencia Molecular: Moléculas, Supermoléculas y Materiales*

Tipo de actividad: Jornada Científica Ambito: Nacional

Fecha: 1 Diciembre 2000

Título: *V Escuela Nacional de Materiales Moleculares*

Tipo de actividad: Congreso (Presidente Comité Organizador) Ambito: Nacional

Fecha: 2-10 Junio 2001

Título: *Nanociencia y Electrónica Molecular*

Tipo de actividad: Jornada Científica Ambito: Nacional

Fecha: 23 Noviembre 2001

Título: *The Bottom-Up Approach to Nanoscience: from Self-Organization to Technological Applications*

Tipo de actividad: Jornada Científica Ambito: Nacional

Fecha: 12 Diciembre 2005

Título: *7th International Symposium on Crystalline Organic Metal, Superconductors and Ferromagnets (ISCOM-2007)*

Tipo de actividad: Congreso (Miembro del "National Advisory Committee") Ambito: Internacional

Fecha: 24-29 Septiembre 2007

Título: *IX Escuela Nacional de Materiales Moleculares*

Tipo de actividad: Congreso (Miembro del Comité Organizador Local) Ambito: Nacional

Lugar y Fecha: Peñíscola (España) 17-22 Febrero 2008

Título: *I Jornadas de Puertas Abiertas del Parc Científic de la Universitat de València (EXPOCIENCIA 2009)*

Tipo de actividad: Jornada de Puertas Abiertas Ambito: Nacional

Lugar y Fecha: Valencia (España) 23 Mayo 2009

Título: *International Workshop on Molecular Materials*

Tipo de actividad: Congreso (Miembro del Comité Científico) Ambito: Internacional

Lugar y Fecha: Valencia (España) 2-5 Mayo 2010

Título: *II Jornadas de Puertas Abiertas del Parc Científic de la Universitat de València (EXPOCIENCIA 2010)*

Tipo de actividad: Jornada de Puertas Abiertas Ambito: Nacional

Lugar y Fecha: Valencia (España) 29 Mayo 2010

Título: *III Jornadas de Puertas Abiertas del Parc Científic de la Universitat de València (EXPOCIENCIA 2011)*

Tipo de actividad: Jornada de Puertas Abiertas Ambito: Nacional

Lugar y Fecha: Valencia (España) 28 Mayo 2011

Título: *European Conference on Molecular Electronics (ECME-2011)*

Tipo de actividad: Congreso (Miembro del Comité Científico Local) Ambito: Internacional

Lugar y Fecha: Barcelona (España) 7-10 Septiembre 2011

Título: *XI Jornada Científica del ICMol*

Tipo de actividad: Jornada Científica

Ambito: Nacional

Lugar y Fecha: Valencia (España) 16 Diciembre 2011

Título: *IV Jornadas de Puertas Abiertas del Parc Científic de la Universitat de València (EXPOCIENCIA 2012)*

Tipo de actividad: Jornada de Puertas Abiertas

Ambito: Nacional

Lugar y Fecha: Valencia (España) 19 Mayo 2012

Título: *V Jornadas de Puertas Abiertas del Parc Científic de la Universitat de València (EXPOCIENCIA 2013)*

Tipo de actividad: Jornada de Puertas Abiertas

Ambito: Nacional

Lugar y Fecha: Valencia (España) 25 Mayo 2013

Título: *XV Escuela Nacional de Materiales Moleculares*

Tipo de actividad: Congreso (Presidente Comité Organizador)

Ambito: Nacional

Lugar y Fecha: Gandía (España) 2-7 Febrero 2014

Facultad / Escuela: Facultad de Químicas
Fecha: En realización Calificación:

Título: *"Sistemas Dador-Aceptor covalentes y supramoleculares"*
Doctorando: Joaquín Calbo Roig (Becario FPU)
Universidad: Universitat de València
Facultad / Escuela: Facultad de Químicas
Fecha: En realización Calificación:

Otros méritos o aclaraciones que se desee hacer constar.

COMPONENTES DE INVESTIGACIÓN Y DOCENTES

1. Tramos de investigación reconocidos: 5 (1982/1987; 1988/1993; 1994/1999, 2000/2005, 2006/2011)
2. Tramos de docencia reconocidos: 6 (1982/1986; 1987/1991; 1992/1996; 1997/2001, 2002/2006, 2007/2011)

INDICE h: 38 (Citas promedio por artículo: 22,57)

(Clave para la búsqueda: - Author: "ORTI E NOT CANELLES P* NOT PRIETO V* NOT HUGUET JM*" - Address: "UNIV VALENCIA OR NOTRE DAME OR UNIV MONS")

TESINAS DE LICENCIATURA Y TRABAJOS FIN DE CARRERA DIRIGIDOS

1. María del Carmen Piqueras García
Descripción Químico-Cuántica del Isomerismo Conformacional de Compuestos Pentaheterocíclicos
Universitat de València, 1991, Sobresaliente.
2. Raúl Crespo Crespo
Parametrización del Método VEH para el Cálculo de Sistemas Poliméricos Derivados del Silicio
Universitat de València, 1992, Sobresaliente.
3. Mercé Boronat i Zaragoza
Estudi Químico-Quàntic de l'Estructura Molecular i Electrònica del Porfíric
Universitat de València, 1993, Sobresaliente.
4. María Jesús Sanchís Carles
Caracterización Teórica de Derivados del Bitiofeno Precursores de Polímeros Conductores de Bajo "Gap"
Universitat de València, 1998, Sobresaliente.
5. Begoña Milián Medina
Nuevos Aceptores de Electrones para Conductores Moleculares. Estudio Teórico de la Relación Estructura Molecular – Capacidad Aceptora
Universitat de València 1999, Sobresaliente y Matrícula de Honor.
6. José Miguel Junquera Hernández
Oligopirroles: Estudio Teórico de las Propiedades Estructurales y Ópticas en Función del Grado de Oxidación
Universitat de València, 2000, Sobresaliente y Matrícula de Honor.
7. María Dolores Gómez Jiménez
Oligotiofenos Electroactivos: Estructura Molecular y Propiedades Ópticas
Universitat de València, 2004, Sobresaliente.
8. Rubén Darío Costa Riquelme
Estudio Teórico de Complejos de Iridio altamente fosforescentes
Universitat de València, 2006, Sobresaliente.
9. Pedro García Gallego
Oligotiofenos Conjugados: Estructura Molecular y Propiedades Ópticas
Universitat de València 2010, Sobresaliente.
10. Joaquín Calbo Roig
Derivados Dador-Aceptor del TTF p-Extendido: Determinación Teórica de Propiedades Estructurales, Electrónicas y Redox
Universitat de València 2011, Sobresaliente.
11. Adrián García Cremades
Complejos Iónicos de Iridio Fosforescentes: Modulación Químico-Cuántica del Color de Emisión
Universitat de València 2013, 10 Sobresaliente – Matrícula de Honor.
12. Mario Grieco Mercado
Determinación Teórica de las Propiedades Estructurales, Electrónicas y Redox de Compuestos Dador-Aceptor π -Conjugados
Universitat de València 2013, 8,5 Notable.

TRABAJO DE INVESTIGACIÓN PARA LA OBTENCIÓN DEL DIPLOMA DE ESTUDIOS AVANZADOS (DEA)

1. María Dolores Gómez Jiménez

Oligotiofenos Electroactivos de Bajo "Gap": Estudio Teórico de la Estructura Molecular y Electrónica

Curso de doctorado interuniversitario: Química Teórica y Computacional

Universitat de València 2006, Sobresaliente.

2. Rubén D. Costa Riquelme

Estudio Teórico-Experimental de Complejos de Coordinación Aplicados en Dispositivos Optoelectrónicos

Curso de doctorado interuniversitario: Química Teórica y Computacional

Universitat de València 2008, Sobresaliente.

3. Juan Aragón March

Estudio Teórico de sistemas oligotiofénicos policonjugados. Establecimiento de relaciones estructura-propiedad

Curso de doctorado interuniversitario: Química Teórica y Computacional

Universitat de València 2008, Sobresaliente.

TESIS DE MASTER DIRIGIDAS

1. Antonio Pertegás Ojeda

Ionic Liquids applied to light emitting electrochemical cells

Master en Nanociencia y Nanotecnología Molecular.

Universitat de València, 2011, Sobresaliente.

2. Daniel Tordera Salvador

A study on the operation mechanism of light emitting electrochemical cells

Master en Nanociencia y Nanotecnología Molecular.

Universitat de València, 2011, Sobresaliente.

3. Manuel Delgado Huguet

Novel iridium tris-heteroleptic ionic complex for light-emitting electrochemical cells

Master en Nanociencia y Nanotecnología Molecular.

Universitat de València, 2012, Sobresaliente.

4. Joaquín Calbo Roig

Theoretical determination of the anchoring mode in an exTTF-based dye@TiO₂ system for dye-sensitized solar cells

Master en Química Teórica y Modelización Computacional.

Universitat de València, 2013, 10 Sobresaliente.

ESTANCIAS DE INVESTIGADORES VISITANTES

1. Estael Ochoa Rodríguez

Centro de procedencia: Universidad de la Habana (Cuba)

Año y duración: 1998 (6 meses)

Tema: *Determinación de la Estructura Molecular y Electrónica de Oligómeros de Poli(tienilpirrol)*

2. Corinne Wartelle

Centro de procedencia: Lab. de Chimie-Physique LASIR-HEI, CNRS, Lille (Francia)

Año y duración: 2002 (2 meses)

Tema: *Estudio Teórico de la Evolución de Eteres-Corona Derivados del TTF con el Estado de Oxidación y de su Posible Utilización como Agentes Complejantes Reversibles de Cationes Metálicos*

3. María del Carmen Ruiz Delgado

Centro de procedencia: Dept. Química Física, Universidad de Málaga

Año y duración: 2003 (3 meses)

Tema: *Determinación Teórica de las Propiedades Estructurales, Vibracionales y Ópticas de Distintas Familias de Oligotiofenos Quinoides y Aromático"*

CONGRESOS, CURSOS Y REUNIONES CIENTIFICAS

1. Moderador de 29 sesiones en congresos internacionales/nacionales.

2. Miembro de 3 mesas redondas en congresos nacionales.

3. Cursos: - 14 horas en el curso de postgrado "Nuevos Materiales", Universitat de València (1994 y 1995), subvencionado por la Generalitat Valenciana.
- 8 horas en el curso de postgrado "Nuevos Materiales Orgánicos", Univ. Complutense de Madrid (1995, 1996 y 1997), subvencionado por el Fondo Social Europeo.
4. Vocal del Grupo Especializado de Materiales Moleculares de la Real Sociedad Española de Química.
5. Miembro del Comité Editorial de Anales de la Real Sociedad Española de Química.

PARTICIPACIÓN EN CURSOS DE POSTGRADO Y MASTERS

- Curso:* Curso de Postgrado sobre "*Nuevos Materiales*".
Asistentes: Licenciados en Ciencias Químicas, Ciencias Físicas e Ingenieros.
Organizador: Dr. D. Beltrán, Facultad de Químicas (Fundación Universidad Empresa de Valencia)
Participación: 14h sobre "*Materiales Orgánicos Eléctrica y Ópticamente Activos*".
Fechas: Diciembre 1993 – Abril 1994, Valencia.
- Curso:* Curso de Postgrado sobre "*Nuevos Materiales*".
Asistentes: Licenciados en Ciencias Químicas, Ciencias Físicas e Ingenieros.
Organizador: Dr. D. Beltrán, Facultad de Químicas (Fundación Universidad Empresa de Valencia)
Participación: 14h sobre "*Materiales Orgánicos Eléctrica y Ópticamente Activos*".
Fechas: Mayo 1994 – Octubre 1994, Valencia.
- Curso:* Curso de Formación del Fondo Social Europeo sobre "*Nuevos Materiales Orgánicos*".
Asistentes: Licenciados en Ciencias Químicas, Ciencias Físicas e Ingenieros.
Organizador: Dr. C. Seoane, Fundación General de la Universidad Complutense de Madrid.
Participación: 4h sobre "*Estructura Molecular de Materiales Electroactivos*".
Fechas: 17 de Abril – 12 de Mayo de 1995, Alcorcón (Madrid).
- Curso:* Curso de Formación del Fondo Social Europeo sobre "*Nuevos Materiales Orgánicos*".
Asistentes: Licenciados en Ciencias Químicas, Ciencias Físicas e Ingenieros.
Organizador: Dr. C. Seoane, Fundación General de la Universidad Complutense de Madrid.
Participación: 8h sobre "*Estructura Molecular de Materiales Electroactivos*".
Fechas: 15 de Mayo – 18 de Junio de 1996, Alcorcón (Madrid).
- Curso:* Máster interuniversitario (7 Universidades) en "*Nanociencia y Nanotecnología Molecular*", 2º año.
Asistentes: Licenciados en Ciencias Químicas, Físicas y Biológicas e Ingenieros.
Organizador: Dr. E. Coronado, Instituto de Ciencia Molecular, Universidad de Valencia.
Participación: 1 Crédito ECTS sobre "*Electrónica Molecular: Cálculo Teórico de las Propiedades Moleculares de Sistemas Electroactivos*".
Fechas: 13 – 25 de Octubre de 2008, Burjassot (Valencia).
- Curso:* Máster interuniversitario (7 Universidades) en "*Nanociencia y Nanotecnología Molecular*", 2º año.
Asistentes: Licenciados en Ciencias Químicas, Físicas y Biológicas e Ingenieros.
Organizador: Dr. J.J. Palacios, Universidad de Alicante.
Participación: 1 Crédito ECTS sobre "*Electrónica Molecular: Cálculo Teórico de las Propiedades Moleculares de Sistemas Electroactivos*".
Fechas: 13 – 30 de Octubre de 2009, Alicante.
- Curso:* Máster interuniversitario (4 Universidades) en "*Química Orgánica*", 2º año.
Asistentes: Licenciados en Ciencias Químicas y Biológicas.
Organizador: Dr. C. Claessens, Universidad Autónoma de Madrid.
Participación: 1,5 Créditos ECTS sobre "*Sistemas Moleculares Electroactivos para Electrónica Molecular*".
Fechas: 21 – 25 de Junio de 2010, Madrid.
- Curso:* Máster interuniversitario (7 Universidades) en "*Nanociencia y Nanotecnología Molecular*", 2º año.
Asistentes: Licenciados en Ciencias Químicas, Físicas y Biológicas e Ingenieros.
Organizador: Dra. M.L. Rodríguez, Universidad de Valladolid.

Participación: 2 Crédito ECTS sobre “*Electrónica Molecular: Cálculo Teórico de las Propiedades Moleculares de Sistemas Electroactivos*”.

Fechas: 11 – 22 de Octubre de 2010, Valladolid.

Curso: Máster interuniversitario (7 Universidades) en “*Nanociencia y Nanotecnología Molecular*”, 2º año.

Asistentes: Licenciados en Ciencias Químicas, Físicas y Biológicas e Ingenieros.

Organizador: Dr. J. Bisquert, Universidad Jaume I de Castellón.

Participación: 1 Crédito ECTS sobre “*Electrónica Molecular: Cálculo Teórico de las Propiedades Moleculares de Sistemas Electroactivos*”.

Fechas: 10 – 21 de Octubre de 2011, Castellón.

Curso: Máster Universitario en “*Química*” de la Universidad de Granada

Asistentes: Licenciados en Ciencias Químicas.

Organizador: Dr. M. P. Sánchez, Universidad de Granada.

Participación: Conferencia “*Materiales Electroluminiscentes Basados en Complejos Iónicos de Metales de Transición*”.

Fechas: 1 de Junio de 2012, Granada.

Curso: Máster interuniversitario (4 Universidades) en “*Química Orgánica*”, 2º año.

Asistentes: Licenciados en Ciencias Químicas y Biológicas.

Organizador: Dra. C. Carreño, Universidad Autónoma de Madrid.

Participación: 1,5 Créditos ECTS sobre “*Sistemas Moleculares Electroactivos para Electrónica Molecular*”.

Fechas: 11 – 15 de Junio de 2012, Madrid.

Curso: Máster interuniversitario (7 Universidades) en “*Nanociencia y Nanotecnología Molecular*”, 2º año.

Asistentes: Licenciados en Ciencias Químicas, Físicas y Biológicas e Ingenieros.

Organizador: Dr. T. Torres, Universidad Autónoma de Madrid.

Participación: 1 Crédito ECTS sobre “*Electrónica Molecular: Cálculo Teórico de las Propiedades Moleculares de Sistemas Electroactivos*”.

Fechas: 15 – 26 de Octubre de 2012, Madrid.

Curso: Máster interuniversitario (6 Universidades) en “*Nanociencia y Nanotecnología Molecular*”, 2º año.

Asistentes: Licenciados en Ciencias Químicas, Físicas y Biológicas e Ingenieros.

Organizador: Dr. F. Langa, Universidad de Castilla La Mancha.

Participación: 2 Crédito ECTS sobre “*Electrónica Molecular: Cálculo Teórico de las Propiedades Moleculares de Sistemas Electroactivos*”.

Fechas: 14 – 25 de Octubre de 2013, Toledo.

PARTICIPACION EN COMITES EVALUADORES

1. Comisión de evaluación de becas de Formación de Profesorado Universitario (FPU).
2. Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva.
3. Barcelona Supercomputing Center (BSC) – Red Española de Supercomputación (RES).
4. Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR) de la Generalitat de Catalunya.
5. Comisión de Selección de Proyectos de la Dirección General de Investigación y Gestión del Plan Nacional de I+D+i del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN)
6. Agencia para la Calidad del Sistema Universitario de Castilla y León (ACSUCYL).
7. Proyectos Fomenta (La Rioja).

ACTIVIDADES COMO EVALUADOR

1. Revistas: Angew. Chem., J. Am. Chem. Soc., Chem. Eur. J., J. Chem. Educ., Adv. Mater., Adv. Funct. Mater., Chem. Mater., J. Mater. Chem., J. Phys. Chem., Phys. Chem. Chem. Phys., Chem. Phys. Lett., ChemPhysChem, J. Chem. Phys., J. Chem. Theory Comput., Comput. Theor. Chem., Int. J. Quantum Chem., J. Mol. Struct., J. Org. Chem., Synth. Met., Org. Lett., Eur. J. Org. Chem., Inorg. Chem., Polyhedron.
2. Proyectos: NATO Collaborative Research Grants, ANEP, MECP, AGAUR, BSC.

BECAS OBTENIDAS

1. Ayuda del INAPE para la realización de la Tesina de Licenciatura, 1 año (1980).
2. Beca de Formación de Personal Investigador del MEC, 4 años (1982 - 1985).
3. Beca de la Generalitat Valenciana para estancia postdoctoral de un año en el Laboratoire de Chimie Théorique Appliquée, Facultés Universitaires Notre-Dame de la Paix, Namur - Bélgica, (1987).
4. Distintas becas para estancias en el extranjero, total de 9 meses (última estancia: 3 meses en 1998).

PREMIOS

1. Premio de la Licenciatura en Química, promoción 1978/79, de la Fundación Cañada-Blanch.
2. Premio Extraordinario de Licenciatura del curso 1981/82.
3. Premio Tesina de Licenciatura en Química, curso 1981/82, de la Fundación Cañada-Blanch.
4. Premio Extraordinario de Doctorado del curso 1985/86.
5. 2011 IUPAC Prize for Young Chemists a la Tesis realizada por Rubén D. Costa Riquelme con título "*Theoretical and Experimental Study of Light-Emitting Electrochemical Cells Based on Ionic Transition-Metal Complexes. From the Molecule to the Device*" bajo la dirección de los Drs. Enrique Ortí Guillén y Henk J. Bolink defendida en el Instituto de Ciencia Molecular de la Universidad de Valencia el 20-09-2010. Esta Tesis recibió, además, el Premio de Doctorado Nanomatmol 2010 a la mejor Tesis Doctoral otorgado por el grupo especializado de Nanociencia, Nanotecnología y Materiales Moleculares de la RSEQ.

PARTICIPACIÓN EN REDES TEMÁTICAS

Título de la Acción: **"Molecular Materials and Functional Polymers for Advanced Devices"**

Entidad financiadora: Unión Europea (ref.: COST ACTION 518)
Entidades participantes: Universidades y Centros de Investigación de 18 Países Europeos
Duración: Junio 1996 – Junio 2000
Investigador responsable: Dr. **Tomás Torres** (Working group 2: Molecular Materials)
Dr. **Werner Blau** (Chairman)

Título de la Red: *Polímeros Orgánicos / Inorgánicos Conductores*
Entidad financiadora: Generalitat Valenciana (XT00-5)
Entidades participantes: Univ. de València, Univ. Jaume I de Castellón, Univ. de Málaga y Univ. Politéc. de Cartagena
Duración, desde: Enero 2000 hasta: Nov. 2000 Cuantía de la subvención: 500.000 pts
Investigador responsable: Dr. E. Coronado Miralles
Número de grupos participantes: 5

Título de la Red: *Polímeros Orgánicos / Inorgánicos Conductores*
Entidad financiadora: Generalitat Valenciana (XT01-5)
Entidades participantes: Univ. de València, Univ. Jaume I de Castellón, Univ. de Málaga y Univ. Politéc. de Cartagena
Duración, desde: Enero 2001 hasta: Nov. 2001 Cuantía de la subvención: 500.000 pts
Investigador responsable: Dr. E. Ortí Guillén
Número de grupos participantes: 5

SOCIEDADES CIENTIFICAS A LAS QUE PERTENECE

1. MRS: Materials Research Society (desde 1989).
2. EMRS: European Materials Research Society (desde 1991).
3. WATOC: World Association of Theoretically Oriented Chemists (desde 1997).
4. Real Sociedad Española de Química. Grupo Especializado de Materiales Moleculares.



Ministerio de Economía y Competitividad
Secretaría de Estado de Investigación, Desarrollo e Innovación

Currículum

Nombre: ANTONIO REY GAYO

Fecha: 6-III-2014

Actividades anteriores de carácter científico profesional

Puesto	Institución	Fechas
Becario Predoctoral del P.F.P.I.	UCM. Dpto. Química Física I	1987 - 1990
Profesor Ayudante de E.U.	UCM. Dpto. Química Física I	Curso 1990 - 91
Becario Postdoctoral MEC/Fulbright	Scripps Research Institute. California (EE.UU.)	1990-92
Profesor Titular de Universidad	UCM. Dpto. Química Física I	1991 - 2011

Idiomas (R = regular, B = bien, C = correctamente)

Idioma	Habla	Lee	Escribe
INGLÉS	C	C	C
ALEMÁN	R	R	R

Participación en proyectos de I+D+i financiados en convocatorias públicas.

(nacionales y/o internacionales)

Título del proyecto: "Estudio experimental y por simulación en ordenador del efecto del disolvente sobre las propiedades de polímeros".

Entidad financiadora: Dirección General de investigación Científica y Técnica. Proyecto PB89-0093.

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 1989 hasta: 1992 Cuantía de la subvención: 6.750.000 Pta

Investigador responsable: Juan J. Freire Gómez

Número de investigadores participantes: 5

Título del proyecto: "Modelización por ordenador del efecto del disolvente sobre las propiedades de polímeros".

Entidad financiadora: Acciones integradas Hispano-Británicas Proyecto no. 71 (área 2).

Entidades participantes: Univ. Complutense de Madrid. Manchester Institute of Science and Technology

Duración, desde: 1990 hasta: 1991 Cuantía de la subvención: 365.000 Pta

Investigador responsable: Juan J. Freire Gómez, Julian H.R. Clarke

Número de investigadores participantes: 8

Título del proyecto: "Modelización por ordenador de sistemas poliméricos".

Entidad financiadora: Acciones integradas Hispano-Británicas Proyecto nº 111 (área 2).

Entidades participantes: Univ. Complutense de Madrid. Manchester Institute of Science and Technology

Duración, desde: 1991 hasta: 1992 Cuantía de la subvención: 265.000 Pta

Investigador responsable: Juan J. Freire Gómez, Julian H.R. Clarke

Número de investigadores participantes: 9

Título del proyecto: "Estudio de la estructura conformacional en sistemas macromoleculares complejos"

Entidad financiadora: Dirección General de investigación Científica y Técnica. Proyecto PB92-0227.

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 1992 hasta: 1995 Cuantía de la subvención: 9.400.000 Pta

Investigador responsable: Juan J. Freire Gómez

Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: "Simulación en ordenador de la estructura terciaria de proteínas globulares"

Entidad financiadora: Universidad Complutense de Madrid. Ayudas a Grupos Precompetitivos. Proyecto PR189/92-4183.

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 1993 hasta: 1994 Cuantía de la subvención: 1.000.000 Pta

Investigador responsable: Antonio Rey Gayo

Número de investigadores participantes: 1

Título del proyecto: "Modelización de sistemas de moléculas de cadena, polímeros y proteínas"

Entidad financiadora: Dirección General de investigación Científica y Técnica. Proyecto PB95-0384.

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 1995 hasta: 1998 Cuantía de la subvención: 6.000.000 Pta

Investigador responsable: Juan J. Freire Gómez

Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: "Propiedades conformacionales de polímeros ramificados, copolímeros y proteínas"

Entidad financiadora: Secretaría de Estado de Universidades, Investigación y Desarrollo. Proyecto PB98-0791

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 1998 hasta: 2002 Cuantía de la subvención: 7.000.000

Investigador responsable: Juan J. Freire Gómez

Número de investigadores participantes: 3

Título del proyecto: "New Routes to Understanding Polymer Materials using Experiments and Realistic Modelling"

Entidad financiadora: European Comisión. TMR Research Network. NEWRUP Project.

Entidades participantes: UMIST, Manchester, UK; Université Libre de Bruxelles, Belgium; E.S.P.C.I., Paris, France; Universidad Complutense de Madrid, Spain; Heriot-Watt University, Edinburgh, UK; Foundation for Research and Technology Hellas, Patras, Greece; Max Planck Institute für Polymerforschung, Mainz, Germany.

Duración, desde: 1999 hasta: 2002 Cuantía de la subvención: 185.195 Ecus (para la UCM)

Investigador responsable: Juan J. Freire Gómez (en la UCM)

Número de investigadores participantes: 4 (en la UCM)

Título del proyecto: "Simulación del plegamiento de proteínas y de polímeros complejos"

Entidad financiadora: Secretaría de Política Científica y Tecnológica. Proyecto BQU2002-04626-C02-01

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid y UNED

Duración, desde: 2002 hasta: 2005 Cuantía de la subvención: 27.400 € (para la UCM)

Investigador responsable: Antonio Rey Gayo

Número de investigadores participantes: 3 (en la UCM), 3 (en la UNED)

Título del proyecto: "Simulación de sistemas poliméricos complejos y proteínas"

Entidad financiadora: Univ. Complutense de Madrid. Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación UCM.

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: XII-2005 hasta: XI-2006 Cuantía de la subvención: 5.250 €

Investigador responsable: Antonio Rey Gayo

Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: "Simulación del plegamiento y agregación de proteínas globulares"

Entidad financiadora: Univ. Complutense. Proyecto PR1/06-14424-A

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: I-2006 hasta: XII-2006 Cuantía de la subvención: 7.000 €

Investigador responsable: Antonio Rey Gayo

Número de investigadores participantes: 5

Título del proyecto: "Simulación del plegamiento y agregación de proteínas globulares"

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia. Proyecto FIS2006-12781-C02-02

Duración desde: 2007 hasta: 2009 Cuantía de la subvención: 20.000 €

Investigador principal: Antonio Rey Gayo

Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: "Simulación de sistemas poliméricos complejos y proteínas"

Entidad financiadora: Univ. Complutense de Madrid / CAM. Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación UCM. Grupo 910068.

Duración desde: Ene. 2007 HASTA: Dic. 2007 Cuantía de la subvención: 6.250 €

Investigador principal: Antonio Rey Gayo

Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: "Nanociencia Molecular"

Entidad financiadora: Ministerio de Educación y Ciencia. Programa CONSOLIDER-INGENIO 2010. Proyecto CSD2007-00010

Duración desde: 2007 HASTA: 2011 Cuantía de la subvención: 5.750.000 €

Investigador principal: Eugenio Coronado Miralles (U. Valencia)

Título del proyecto: "Simulación de sistemas poliméricos complejos y proteínas"

Entidad financiadora: Univ. Complutense de Madrid / CAM. Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación UCM. Grupo 910068. Proyecto CCG07-UCM/ESP-2520

Duración desde: Ene. 2008 HASTA: Dic. 2008 Cuantía de la subvención: 4.000 €

Investigador principal: Antonio Rey Gayo

Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: Studying protein folding and aggregation with coarse-grained computational models

Entidad financiadora: Acciones Integradas Hispano-Portuguesas. MICINN. Referencia HP2008-0065.

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid y Universidad de Lisboa.

Duración, desde: 2008 hasta: 2009 Cuantía de la subvención: 6.000 €

Investigador responsable: Antonio Rey Gayo

Número de investigadores participantes: 3 (en la UCM)

Título del proyecto: "Simulación de sistemas poliméricos complejos y proteínas"

Entidad financiadora: Univ. Complutense de Madrid/Banco Santander. Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación UCM. Grupo 910068. Proyecto GR58/08

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración desde: Ene. 2009 hasta: Dic. 2010 Cuantía de la subvención: 3.710 €

Investigador principal: Antonio Rey Gayo

Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: "Modelos físicos para la simulación de tránsitos conformacionales en proteínas"

Entidad financiadora: Ministerio de Ciencia e Innovación. Proyecto FIS2009-13364-C02-02

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid y Universidad de Zaragoza

Duración desde: 2010 hasta: 2013 Cuantía de la subvención: 35.000 € (para la UCM)

Investigador principal: Antonio Rey Gayo

Número de investigadores participantes: 4

Título del proyecto: "Química a alta presión, QUIMAPRES"

Entidad financiadora: Comunidad de Madrid. Proyecto S2009/PPQ-1551
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, CSIC
Duración desde: 2010 hasta: 2013 Cuantía de la subvención: 893.300 € (para los seis grupos participantes)
Investigador principal: Antonio Rey Gayo (en el grupo UCM-SIMPOL). Valentín García Baonza (coordinador)
Número de investigadores participantes: 4 (en el grupo UCM-SIMPOL)

Título del proyecto: "Simulación de sistemas poliméricos complejos y proteínas"

Entidad financiadora: Univ. Complutense de Madrid/Banco Santander. Programa de Creación y Consolidación de Grupos de Investigación UCM. Grupo 910068. Proyecto GR35/10-A
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid
Duración desde: Ene. 2011 HASTA: Dic. 2011 Cuantía de la subvención: 1.408,40 €
Investigador principal: Antonio Rey Gayo
Número de investigadores participantes: 4

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2.º caso.

Publicaciones o documentos científico-técnicos

(CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = "review", E = editor,
S = Documento científico-técnico restringido)

Autores (p.o. de firma): Juan J. Freire, Antonio Rey y José García de la Torre
Título: "Theoretical Calculation of Diffusion Coefficient and Viscosity of Star Polymers in Solution"

Ref. revista : Libro
Clave: CL Volumen: Páginas, inicial: 108 final: 111 Fecha: 1985
Editorial (si libro): "Integration of Fundamental Polymer Science and Technology " (L.A. Kleintjens y P.J. Lemstra, editores).
Elsevier.
Lugar de publicación: Londres.

Autores (p.o. de firma): Juan J. Freire, Jesús Pla, Antonio Rey y Rosa Prats
Título: "Monte Carlo Calculations for Linear and Star Polymers with Intramolecular Interactions. 1. Dimensions"

Ref. revista: *Macromolecules* Libro
Clave: A Volumen: 19 Páginas, inicial: 425 final: 427 Fecha: 1986
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Juan J. Freire, Antonio Rey y José García de la Torre
Título: "Monte Carlo Calculations for Linear and Star Polymers with Intramolecular Interactions. 2. Nonpreaveraged Study of Hydrodynamic Properties at the Theta State"

Ref. revista: *Macromolecules* Libro
Clave: A Volumen: 19 Páginas, inicial: 457 final: 462 Fecha: 1986
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey, Juan J. Freire y José García de la Torre
Título: "Monte Carlo Calculations for Linear and Star Polymers with Intramolecular Interactions. 3. Dimensions and Hydrodynamic Properties in Good Solvent Conditions"

Ref. revista: *Macromolecules* Libro
Clave: A Volumen: 20 Páginas, inicial: 342 final: 346 Fecha: 1987
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey, Juan J. Freire y José García de la Torre
Título: "Monte Carlo Calculations for Linear and Star Polymers with Intramolecular Interactions. 4. Dimensions and Hydrodynamic Properties below the Theta State"

Ref. revista: *Macromolecules* Libro
Clave: A Volumen: 20 Páginas, inicial: 2385 final: 2390 Fecha: 1987
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey, Juan J. Freire y José García de la Torre
Título: "Brownian Dynamics of a Flexible Polymer. Internal Modes and Quasielastic Scattering Function"

Ref. revista: *J. Chem Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 90 Páginas, inicial: 2035 final: 2041 Fecha: 1989
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Peter Denking, Antonio Rey y Walther Burchard
Título: "Crosslinking of Poly(Allylamine) with Esters of Diimidic Acids in Aqueous Media"

Ref. revista: *Makromol. Chem. Rapid Commun.* Libro
Clave: A Volumen: 10 Páginas, inicial: 675 final: 681 Fecha: 1989
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: Alemania

Autores (p.o. de firma): José L. García Fernández, Antonio Rey, Juan J. Freire e Inés Fernández de Piérola
Título: "Cyclization Dynamics of Flexible Polymers. Numerical Results from Brownian Trajectories"

Ref. revista: *Macromolecules* Libro
Clave: A Volumen: 23 Páginas, inicial: 2057 final: 2061 Fecha: 1990
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey, Juan J. Freire y José García de la Torre
Título: "Frequency Dependent viscosity of Linear, Ring and Star Gaussian Chains with Fluctuating Hydrodynamic Interactions"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 92 Páginas, inicial: 6278 final: 6282 Fecha: 1990
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey, Juan J. Freire y José García de la Torre
Título: "Brownian Dynamics of Nonlinear Gaussian Chains with Fluctuating Hydrodynamic Interactions. 1. Star Chains."

Ref. revista: *Macromolecules* Libro
Clave: A Volumen: 23 Páginas, inicial: 3948 final: 3953 Fecha: 1990
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey, Juan J. Freire y José García de la Torre
Título: "Brownian Dynamics of Nonlinear Gaussian Chains with Fluctuating Hydrodynamic Interactions. 2. Rings"

Ref. revista: *Macromolecules* Libro
Clave: A Volumen: 23 Páginas, inicial: 3953 final: 3957 Fecha: 1990
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Juan J. Freire y Antonio Rey

Título: "Lower Bounds for the Intrinsic Viscosity of Flexible Polymers. Comparison with Brownian Dynamics Simulation Results for Different Types of Chains"

Ref. revista: *Comput. Phys. Commun.* Libro
Clave: A Volumen: 61 Páginas, inicial: 297 final: 303 Fecha: 1990
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: Holanda

Autores (p.o. de firma): Marvin Bishop, Julian H.R. Clarke, Antonio Rey y Juan J. Freire
Título: "The Shape of Linear and Star Polymers with and without Excluded Volume"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 92 Páginas, inicial: 4009 final: 4011 Fecha: 1991
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Arturo G. Aizpiri, Antonio Rey, Jorge Dávila, Ramón G. Rubio, John A. Zollweg y William B. Streett
Título: "Experimental and Theoretical Study of the Equation of State of CHF_3 in the Near-Critical Region"

Ref. revista: *J. Phys. Chem.* Libro
Clave: A Volumen: 95 Páginas, inicial: 3351 final: 3357 Fecha: 1991
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Marvin Bishop, Julian H.R. Clarke, Antonio Rey y Juan J. Freire
Título: "The Shape of Two-Dimensional Linear and Star Polymers with and without Excluded Volume"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 95 Páginas, inicial: 608 final: 611 Fecha: 1991
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey, Juan J. Freire y José García de la Torre
Título: "Translational Diffusion, Relaxation Times, and Quasi-Elastic Scattering of Flexible Chains with excluded Volume and Fluctuating Hydrodynamic Interactions"

Ref. revista: *Macromolecules* Libro
Clave: A Volumen: 24 Páginas, inicial: 4666 final: 4672 Fecha: 1991
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey y Juan J. Freire
Título: "Numerical Simulation of the Cyclization Dynamics for Flexible Chains with Excluded Volume"

Ref. revista: *Macromolecules* Libro
Clave: A Volumen: 24 Páginas, inicial: 4673 final: 4678 Fecha: 1991
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Marvin Bishop, Julian H.R. Clarke, Antonio Rey y Juan J. Freire
Título: "Investigation of the End-to-End Vector Distribution Function for Linear Polymers in Different Regimes"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 95 Páginas, inicial: 4589 final: 4592 Fecha: 1991
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Juan J. Freire, Antonio Rey, Marvin Bishop y Julian H.R. Clarke
Título: "Dimensions and Intrinsic Viscosities of Long Linear and Star Chains in Good and Theta Solvent Conditions"

Ref. revista: *Macromolecules* Libro
Clave: A Volumen: 24 Páginas, inicial: 6494 final: 6499 Fecha: 1991
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey y Jeffrey Skolnick
Título: "Comparison of Lattice Monte Carlo Dynamics and Brownian Dynamics Folding Pathways of α -Helical Proteins"

Ref. revista: *Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 158 Páginas, inicial: 199 final: 219 Fecha: 1991
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: Holanda

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey y Jeffrey Skolnick
Título: "Efficient Algorithm for the Reconstruction of a Protein Backbone from the α -Carbon Coordinates"

Ref. revista: *J. Comput. Chem.* Libro
Clave: A Volumen: 13 Páginas, inicial: 443 final: 456 Fecha: 1992
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey, Juan J. Freire y José García de la Torre
Título: "Brownian Dynamics of Flexible Polymer Chains with Excluded Volume and Hydrodynamic Interactions. A Comparison with Monte Carlo and Theoretical Results"

Ref. revista: *Polymer* Libro
Clave: A Volumen: 33 Páginas, inicial: 3477 final: 3482 Fecha: 1992
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey, Juan J. Freire, Marvin Bishop y Julian H.R. Clarke
Título: "Radius of Gyration and Viscosity of Linear and Star Polymers in Different Regimes"

Ref. revista: *Macromolecules* Libro
Clave: A Volumen: 25 Páginas, inicial: 1311 final: 1315 Fecha: 1992
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Antonio López Rodríguez, Antonio Rey y Juan J. Freire
Título: "Monte Carlo Simulation of the Dynamics and Quasielastic Scattering in Many-Chain Polymer Systems"

Ref. revista: *Macromolecules* Libro
Clave: a Volumen: 25 Páginas, inicial: 3266 final: 3272 Fecha: 1992

Editorial (si libro):

Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey, Andrzej Kolinski, Jeffrey Skolnick y Yehudi K. Levine

Título: "Effect of Double Bonds on the Dynamics of Hydrocarbon Chains"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.*

Libro

Clave: A Volumen: 97 Páginas, inicial: 1240 final: 1249 Fecha: 1992

Editorial (si libro):

Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey y Jeffrey Skolnick

Título: "Computer Modeling and Folding of Four-Helix Bundles"

Ref. revista: *PROTEINS: Structure, Function and Genetics*

Libro

Clave: A Volumen: 16 Páginas, inicial: 8 final: 28 Fecha: 1993

Editorial (si libro):

Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Jeffrey Skolnick, Andrzej Kolinski, Charles L. Brooks III, Adam Godzik y Antonio Rey

Título: "A Method for Predicting Protein Structure from Sequence"

Ref. revista: *Current Biology*

Libro

Clave: A Volumen: 3 Páginas, inicial: 414 final: 423 Fecha: 1993

Editorial (si libro):

Lugar de publicación: Inglaterra

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey y Jeffrey Skolnick

Título: "Computer Simulation of the Folding of Coiled Coils"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.*

Libro

Clave: A Volumen: 100 Páginas, inicial: 2267 final: 2276 Fecha: 1994

Editorial (si libro):

Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Gustavo Luengo, Francisco Ortega, Ramón G. Rubio, Antonio Rey, Margarita G. Prolongo y Rosa M. Masegosa

Título: "Dynamic-Mechanical and Light Scattering Study of the Glass Transition of Poly(Vinylacetate) and a Poly(Vinylacetate)+Poly(4-Hydroxystyrene) Blend"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.*

Libro

Clave: A Volumen: 100 Páginas, inicial: 3258 final: 3267 Fecha: 1994

Editorial (si libro):

Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey y Juan J. Freire

Título: "Dynamic Scattering Function for Diblock Copolymer Chains in Dilute Solutions"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.*

Libro

Clave: A Volumen: 101 Páginas, inicial: 2455 final: 2462 Fecha: 1995

Editorial (si libro):

Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey y Juan J. Freire

Título: "Frequency-dependent viscosity of linear polymer chains. Influence of non-Gaussian effects."

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 102 Páginas, inicial: 6900 final: 6907 Fecha: 1995
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey y Juan J. Freire

Título: "Dynamics of chains in excluded volume conditions. Frequency-dependent viscosity of regular star chains"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 103 Páginas, inicial: 758 final: 766 Fecha: 1996
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Costas Vlahos, Yiannis Tselikas, Nikos Hadjichristidis, Jacques Roovers, Antonio Rey y Juan J. Freire

Título: "Conformation of A₂B and A₃B Miktoarm Star Copolymers in Dilute Solutions"

Ref. revista: *Macromolecules* Libro
Clave: A Volumen: 29 Páginas, inicial: 5599 final: 5604 Fecha: 1996
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Sonia Jorge, Juan J. Freire y Antonio Rey

Título: "On the use of the Gaussian chain as a Monte Carlo simulation model for the equilibrium properties of polymer solutions"

Ref. revista: *Macromol. Theory Simul.* Libro
Clave: A Volumen: 6 Páginas, inicial: 271 final: 286 Fecha: 1997
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: Alemania

Autores (p.o. de firma): Sonia Jorge y Antonio Rey

Título: "Conformational properties of flexible polymer chains in highly confined environments"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 106 Páginas, inicial: 5720 final: 5730 Fecha: 1997
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Luis A. Molina, Antonio Rey y Juan J. Freire

Título: "Numerical simulation of the scattering form factor of star polymers"

Ref. revista: *Comput. Theoret. Polym. Sci* Libro
Clave: A Volumen: 7 Páginas, inicial: 243 final: 252 Fecha: 1997
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: Holanda

Autores (p.o. de firma): Marta Ortiz-Repiso, Juan J. Freire y Antonio Rey
Título: "Intramolecular Reaction Rates of Flexible Polymers. 1. Simulation Results and the Classical Theory"

Ref. revista: *Macromolecules* Libro
Clave: A Volumen: 31 Páginas, inicial: 8356 final: 8362 Fecha: 1998
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Marta Ortiz-Repiso y Antonio Rey
Título: "Intramolecular Reaction Rates of Flexible Polymers. 2. Comparison with the Renormalization Group Theory"

Ref. revista: *Macromolecules* Libro
Clave: A Volumen: 31 Páginas, inicial: 8363 final: 8369 Fecha: 1998
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Juan J. Freire, Luis A. Molina, Antonio Rey y Keiichiro Adachi
Título: "Relaxation of flexible chains in dilute and non-dilute systems. Dynamic Monte Carlo results for linear and star chains."

Ref. revista: *Macromol. Theory Simul.* Libro
Clave: A Volumen: 8 Páginas, inicial: 321 final: 327 Fecha: 1999
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: Alemania

Autores (p.o. de firma): María M. Gil, Ana M. Rubio y Antonio Rey
Título: "Simplified analysis for the interaction types in two-stranded coiled-coils"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 111 Páginas, inicial: 2311 final: 2321 Fecha: 1999
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): María M. Gil, Ana M. Rubio y Antonio Rey
Título: "Peptide length dependence of a simplified model for the folding of regular two-stranded coiled-coils"

Ref. revista: *Macromol. Theory Simul.* Libro
Clave: A Volumen: 9 Páginas, inicial: 534 final: 542 Fecha: 2000
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: Alemania

Autores (p.o. de firma): Silvia G. Prolongo, Ana M. Rubio y Antonio Rey
Título: "Thermodynamic aspects in a simplified model for the folding of two-stranded coiled-coils"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 113 Páginas, inicial: 11343 final: 11354 Fecha: 2000
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: Alemania

Autores (p.o. de firma): Antonio Rey Gayo y Francisco Calbo Torrecilla
Título: "Estructura de proteínas: plegamiento y priones"

Ref. revista: *Enferm. Infecc. Microbiol. Clin.* Libro
Clave: A Volumen: 20 Páginas, inicial: 161 final: 167 Fecha: 2002
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: España

Autores (p.o. de firma): Susana Magaña, Ana M. Rubio y Antonio Rey
Título: "Influence of the hydrophobic face width on the degree of association of coiled-coil proteins"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 117 Páginas, inicial: 10321 final: 10328 Fecha: 2002
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Lidia Prieto y Antonio Rey
Título: "Influence of the Helical Backbone in the Behavior of a Simple Model for Dimeric Coiled Coil proteins"

Ref. revista: *Macromolecular Theory and Simulations* Libro
Clave: A Volumen: 12 Páginas, inicial: 669 final: 678 Fecha: 2003
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: Alemania

Autores (p.o. de firma): David de Sancho, Lidia Prieto, Ana M. Rubio y Antonio Rey
Título: "Evolutionary method for the assembly of rigid protein fragments"

Ref. revista: *J. Comput. Chem.* Libro
Clave: A Volumen: 26 Páginas, inicial: 131 final: 141 Fecha: 2005
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Lidia Prieto, David de Sancho y Antonio Rey
Título: "Thermodynamics of G δ -type models for protein folding"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 123 Páginas, inicial: 154903-1 final: 154903-8 Fecha: 2005
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): María Larriva, David de Sancho y Antonio Rey
Título: "Evaluation of a mean field potential for protein folding with different interaction centers"

Ref. revista: *Physica A.* Libro
Clave: A Volumen: 371 Páginas, inicial: 449 final: 462 Fecha: 2006
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: Holanda

Autores (p.o. de firma): David de Sancho y Antonio Rey
Título: "Assessment of protein folding potentials with an evolutionary method"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 125 Páginas, inicial: 014904-1 final: 014904-9 Fecha: 2006

Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): David de Sancho y Antonio Rey
Título: "Evaluation of Coarse Grained Models for Hydrogen Bonds in Proteins"

Ref. revista: *J. Comput. Chem.* Libro
Clave: A Volumen: 28 Páginas, inicial: 1187 final: 1199 Fecha: 2007
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Lidia Prieto y Antonio Rey
Título: "Influence of the chain stiffness on the thermodynamics of a Gō-type model for protein folding"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 126 Páginas, inicial: 165103-1 final: 165103-8 Fecha: 2007
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Lidia Prieto y Antonio Rey
Título: "Influence of the native topology on the folding barrier for small proteins"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 127 Páginas, inicial: 175101-1 final: 175101-11 Fecha: 2007
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): David de Sancho y Antonio Rey
Título: "Energy Minimizations with a Combination of Two Knowledge-Based Potentials for Protein Folding"

Ref. revista: *J. Comput. Chem.* Libro
Clave: A Volumen: 29 Páginas, inicial: 1684 final: 1692 Fecha: 2008
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Lidia Prieto y Antonio Rey
Título: "Simulations of the protein folding process using topology-based models depend on the experimental structure"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 129 Páginas, inicial: 115101-1 final: 115101-7 Fecha: 2008
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): M^a Fernanda Rey-Stolle, Marta Enciso y Antonio Rey
Título: "Topology-based models and NMR structures in protein folding simulations"

Ref. revista: *J. Comput. Chem.* Libro
Clave: A Volumen: 30 Páginas, inicial: 1212 final: 1219 Fecha: 2009
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Lidia Prieto y Antonio Rey

Título: "Topology-based potentials and the study of the competition between protein folding and aggregation"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro

Clave: A Volumen: 130 Páginas, inicial: 115101-1 final: 115101-14 Fecha: 2009

Editorial (si libro):

Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): María Larriva, Lidia Prieto, Pierpaolo Bruscolini y Antonio Rey

Título: "A simple simulation model can reproduce the thermodynamic folding intermediate of apoflavodoxin"

Ref. revista: *Proteins* Libro

Clave: A Volumen: 78 Páginas, inicial: 73 final: 81 Fecha: 2009

Editorial (si libro):

Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Marta Enciso y Antonio Rey

Título: "A refined hydrogen bond potential for flexible protein models"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro

Clave: A Volumen: 132 Páginas, inicial: 235102-1 final: 235102-10 Fecha: 2010

Editorial (si libro):

Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Rui D.M. Travasso, Patrícia F.N. Faísca y Antonio Rey

Título: "The protein folding transition state: Insights from kinetics and thermodynamics"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro

Clave: A Volumen: 133 Páginas, inicial: 125102-1 final: 125102-8 Fecha: 2010

Editorial (si libro):

Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Marta Enciso y Antonio Rey

Título: "Improvement of Structure-Based Potentials for Protein Folding by Native and Nonnative Hydrogen Bonds"

Ref. revista: *Biophys. J.* Libro

Clave: A Volumen: 101 Páginas, inicial: 1474 final: 1482 Fecha: 2011

Editorial (si libro):

Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Patrícia F.N. Faísca, Rui D.M. Travasso, Andrea Parisi y Antonio Rey

Título: "Why do protein folding rates correlate with metrics of native topology?"

Ref. revista: *PLoS One* Libro

Clave: A Volumen: 7 Páginas, inicial: e35599 - 1 final: e35599 - 7 Fecha: 2012

Editorial (si libro):

Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Marta Enciso y Antonio Rey

Título: "Simple model for the simulation of peptide folding and aggregation with different sequences"

Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro

Clave: A Volumen: 136 Páginas, inicial: 215103 - 1 final: 215103 - 9 Fecha: 2012

Editorial (si libro):

Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Ramiro Perezzan y Antonio Rey
Título: "Simulating protein unfolding under pressure with a coarse-grained model"
Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen:137 Páginas, inicial: 185102 - 1 final: 185102 – 10 Fecha: 2012
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Marta Enciso y Antonio Rey
Título: "Sketching protein aggregation with a physics based toy model"
Ref. revista: *J. Chem. Phys.* Libro
Clave: A Volumen: 139 Páginas, inicial: 115101 - 1 final: 115101 - 10 Fecha: 2013
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): María Larriva y Antonio Rey
Título: "Design of a rotamer library for coarse-grained models in protein folding simulations"
Ref. revista: *J. Chem. Inform. Model.* Libro
Clave: A Volumen: 54 Páginas, inicial: 302 final: 313 Fecha: 2014
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Autores (p.o. de firma): Vicente González Charro y Antonio Rey
Título: "Intermediates in the folding equilibrium of repeat proteins from the TPR family"
Ref. revista: *Proteins* Libro
Clave: A Volumen: aceptado Páginas, inicial: final: Fecha: 2014
Editorial (si libro):
Lugar de publicación: EE.UU.

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2.º caso.

Estancias en centros extranjeros
(estancias continuadas superiores a un mes)

CLAVE: D = doctorado, P = posdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras (especificar).

Centro: Institut für Makromolekulare Chemie. Albert Ludwigs Universität. Grupo del Prof. Dr. Walther Burchard
Localidad: Freiburg im Br. País Alemania Fecha: 1998 Duración (semanas): 12
Tema: Estudio por dispersión de luz y viscosimetría de procesos de gelificación en disolución acuosa
Clave: D

Centro: Department of Chemistry. University of Manchester Institute of Science and Technology. Grupo del Prof. Julian H.R. Clarke
Localidad: Manchester País Reino Unido Fecha: 1990 Duración (semanas): 5
Tema: Propiedades de transporte de polímeros en disolución
Clave: O (acción integrada Hispano-Británica)

Centro: Department of Molecular Biology. The Scripps Research Institute. Grupo del Prof. Jeffrey Skolnick
Localidad: La Jolla, California País EE.UU Fecha: 1990-1992 Duración (semanas): 106
Tema: Estudio por simulación del plegamiento de proteínas globulares
Clave: P

Centro: Department of Molecular Biology. The Scripps Research Institute. Grupo del Prof. Jeffrey Skolnick
Localidad: La Jolla, California País EE.UU Fecha: 1993 Duración (semanas): 9
Tema: Estudio por simulación del plegamiento de proteínas globulares
Clave: I

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2.º caso.

Contribuciones a congresos

Autores: Juan J. Freire, Antonio Rey, Ana M. Rubio y José García de la Torre
Título: Simulation Results on Hydrodynamic Properties of Single Linear Chains and Star Polymers
Tipo de participación: Comunicación Oral
Congreso: Conference on "Macromolecular Flexibility and Behaviour in Solution". The Institute of Physics. Gran Bretaña.
Publicación:

Lugar celebración: Bristol (Reino Unido) Fecha: Abril, 1986

Autores: Juan J. Freire y Antonio Rey
Título: Cálculo Teórico de Propiedades Hidrodinámicas de Polímeros Flexibles y en Forma de Estrella
Tipo de participación: Presentación Oral
Congreso: XXI Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Publicación:

Lugar celebración: Santiago de Compostela (España) Fecha: Septiembre, 1986

Autores: Propiedades Hidrodinámicas de Polímeros de Cadena Corta
Título: Juan J. Freire, Ana M. Rubio y Antonio Rey
Tipo de participación: Póster
Congreso: Reunión Nacional sobre "Fenómenos de Relajación en Polímeros y Sistemas Multicomponentes"
Publicación:

Lugar celebración: Valencia (España) Fecha: Junio, 1987

Autores: Juan J. Freire, Antonio Rey y José García de la Torre
Título: Brownian Trajectories of Flexible Polymers. Applications to the Study of Quasielastic Light Scattering and Other Dynamic Properties
Tipo de participación: Comunicación Oral
Congreso: IUPAC 32nd International Symposium on Macromolecules
Publicación:

Lugar celebración: Kyoto (Japón) Fecha: Agosto, 1988

Autores: Antonio Rey, Juan J. Freire y José García de la Torre
Título: Trayectorias Brownianas para Cadenas Gaussianas
Tipo de participación: Comunicación Oral
Congreso: XXII Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Publicación:

Lugar celebración: Murcia (España) Fecha: Septiembre, 1988

Autores: Antonio Rey, José L. Fernández, Juan J. Freire e Inés Fernández de Piérola
Título: Brownian Simulation of the Cyclization Dynamics of Chain Molecules
Tipo de participación: Comunicación Oral
Congreso: Symposium on "Computer Simulation of Polymers" (American Chemical Society)
Publicación:

Lugar celebración: Miami Beach (EE.UU.) Fecha: Septiembre, 1989
Autores: Juan J. Freire, Antonio Rey y José García de la Torre

Título: Frequency-Dependent Viscosity of Rouse Chains with Fluctuating Hydrodynamic Interactions
Tipo de participación: Comunicación Oral
Congreso: Joint British-Spanish-Portuguese Rheology Meeting on "Molecular Structure and Rheology of Polymers"
Publicación:

Lugar celebración: Lisboa (Portugal)

Fecha: Noviembre, 1989

Autores: Antonio Rey, Andrzej Sikorski, Andrzej Kolinski y Jeffrey Skolnick
Título: Dynamic Monte Carlo Simulation of Ring and Branched Molecules
Tipo de participación: Comunicación Oral
Congreso: Symposium on "Polymers of Geometrical Beauty"(American Chemical Society)
Publicación:

Lugar celebración: Nueva York (EE.UU.)

Fecha: Agosto, 1991

Autores: Jeffrey Skolnick, Adam Godzik, Mariusz Milik y Antonio Rey
Título: Simulations of Globular Protein Folding, Structure and Dynamics
Tipo de participación: Comunicación Oral
Congreso: American Chemical Society Western Regional Meeting
Publicación:

Lugar celebración: Anaheim, California (EE.UU.)

Fecha: Octubre, 1991

Autores: Antonio Rey, Yehudi K. Levine, Andrzej Kolinski y Jeffrey Skolnick
Título: Dynamics of hydrocarbon chains with double bonds
Tipo de participación: Presentación Oral
Congreso: 203rd National Meeting of the American Chemical Society
Publicación:

Lugar celebración: San Francisco, CA (EE.UU.)

Fecha: Abril, 1992

Autores: Jeffrey Skolnick, Andrzej Kolinski, Adam Godzik, Mariusz Milik y Antonio Rey
Título: Simulation of Globular Protein Folding, Structure and Dynamics
Tipo de participación: Conferencia Invitada
Congreso: Karolinska Institute School on "Understanding Protein Folding"
Publicación:

Lugar celebración: Estocolmo (Suecia)

Fecha: Julio, 1992

Autores: Antonio Rey
Título: Utilidad de los modelos simplificados en el problema del plegamiento de proteínas
Tipo de participación: Conferencia invitada
Congreso: Reunión Nacional sobre "Análisis Computacional de la Estructura y Evolución de Macromoléculas Biológicas"
Publicación:

Lugar celebración: Valencia (España)

Fecha: Noviembre, 1992

Autores: A. Rey, L. A. Molina y J. J. Freire
Título: Simulation of Copolymer Chain Dynamics
Tipo de participación: Presentación oral
Congreso: International Meeting on "Relaxation in Complex Systems"

Publicación:

Lugar celebración: Alicante (España)

Fecha: Junio, 1993

Autores: Antonio Rey

Título: Simplified Computer Models of Protein Folding

Tipo de participación: Conferencia invitada/clase

Congreso: Curso de Verano de la Univ. Complutense de Madrid: "Protein Design: From Experiments to Computers"

Publicación:

Lugar celebración: El Escorial (España)

Fecha: Julio, 1994

Autores: Jeffrey Skolnick, Andrzej Kolinski and Antonio Rey

Título: "A Hierarchical Simulation Method of Protein Folding"

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: International Workshop on "Computational Approaches in the Analysis and Engineering of Proteins"

Publicación: Centro de Reuniones Internacionales sobre Biología, vol. 34. Instituto Juan March de estudios e Investigaciones. Madrid, 1994

Lugar celebración: Madrid (España)

Fecha: Noviembre, 1994

Autores: Antonio Rey

Título: "Estructura de Proteínas: Plegamiento y Priones"

Tipo de participación: Conferencia invitada/Clase

Congreso: Curso de Verano de la Universidad Rey Juan Carlos, "Encefalopatías Espongiformes: ¿Un problema social?"

Publicación:

Lugar celebración: Ronda, Málaga (España)

Fecha: Julio, 2001

Autores: Susana Magaña, Nuria Reyero, y Antonio Rey

Título: "Simulations with a simple model of dimeric proteins"

Tipo de participación: Póster

Congreso: Conference of the SIMU European Program, on "Bridging the Time-Scale Gap"

Publicación:

Lugar celebración: Konstanz (Alemania)

Fecha: Septiembre, 2001

Autores: Lidia Prieto y Antonio Rey

Título: "Simulations of protein folding with a simple model"

Tipo de participación: Conferencia invitada

Congreso: Congreso-Conferencia Inaugural del Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos

Publicación:

Lugar celebración: Zaragoza (España)

Fecha: Febrero, 2003

Autores: David de Sancho, Lidia Prieto y Antonio Rey

Título: "Evolutionary Method for the Assembly of Elements of Secondary Structure"

Tipo de participación: Póster

Congreso: BIFI 2004. I International Conference. "Biology after the Genome: A Physical View"

Publicación:

Lugar celebración: Zaragoza (España)

Fecha: Febrero, 2004

Autores: Lidia Prieto y Antonio Rey

Título: "Potenciales tipo Gō para modelos "off-lattice" de plegamiento de proteínas"

Tipo de participación: Póster

Congreso: BIFI 2005.

Publicación:

Lugar celebración: Zaragoza (España)

Fecha: Febrero, 2005

Autores: David de Sancho y Antonio Rey

Título: "Evaluación de tres potenciales de plegamiento de proteínas con una estrategia evolutiva"

Tipo de participación: Póster

Congreso: BIFI 2005.

Publicación:

Lugar celebración: Zaragoza (España)

Fecha: Febrero, 2005

Autores: Lidia Prieto y Antonio Rey

Título: "What the heat capacity can and cannot tell us in protein folding simulations"

Tipo de participación: Póster

Congreso: Applications of BioCalorimetry 5.

Publicación:

Lugar celebración: Zaragoza (España)

Fecha: Julio, 2006

Autores: Antonio Rey

Título: "Exploring protein folding pathways with coarse-grained simulation models"

Tipo de participación: Conferencia Invitada

Congreso: VI Ibero-American Biophysics Congress

Publicación:

Lugar celebración: Madrid (España)

Fecha: Septiembre, 2006

Autores: Lidia Prieto y Antonio Rey

Título: "Topology-based models and free-energy barriers in protein folding simulations"

Tipo de participación: Conferencia Invitada

Congreso: BIFI 2008, III International Congress on "Large Scale Simulations of Complex Systems"

Publicación:

Lugar celebración: Zaragoza (España)

Fecha: Febrero, 2008

Autores: Antonio Rey y Lidia Prieto

Título: "A coarse-grained model for the determination of free energy barriers in the protein folding process"

Tipo de participación: Póster

Congreso: SIMBIOMA 2008 Conference on Molecular Simulations in Biosystems and Material Science

Publicación:

Lugar celebración: Konstanz (Alemania)

Fecha: Abril, 2008

Autores: María Larriva y Antonio Rey

Título: "A new rotamer library in coarse grained models for proteins"

Tipo de participación: Póster

Congreso: XXI Sitges Conference on Statistical Mechanics: Statistical Mechanics of Molecular Biophysics

Publicación:

Lugar celebración: Sitges (España)

Fecha: Junio, 2008

Autores: Antonio Rey

Título: "Exploring the thermodynamics of protein folding with coarse-grained simulation models"

Tipo de participación: Conferencia Invitada

Congreso: Physics of Biological Systems: From Genes to Societies

Publicación:

Lugar celebración: Lisboa (Portugal)

Fecha: Octubre, 2008

Autores: Antonio Rey

Título: "On the reliability of topology-based models for protein folding"

Tipo de participación: Póster

Congreso: International Workshop in Memoriam of Ángel Ramírez Ortiz. "Structural Bioinformatics and Beyond"

Publicación:

Lugar celebración: Madrid (España)

Fecha: Enero, 2009

Autores: Antonio Rey

Título: "Simplified simulation models to explore the thermodynamics of protein folding"

Tipo de participación: Conferencia Invitada

Congreso: IV National Conference BIFI 2009

Publicación:

Lugar celebración: Zaragoza (España)

Fecha: Febrero, 2009

Autores: María Larriva, Eduardo Gil y Antonio Rey

Título: Can a simple topology-based simulation model reproduce protein folding pathways?

Tipo de participación: Póster

Congreso: Psi-k Summer School on "Simulation Approaches to Molecular and Cell Biology"

Lugar celebración: San Sebastián (España)

Fecha: Septiembre, 2009

Autores: Marta Enciso y Antonio Rey

Título: A new coarse-grained hydrogen bond model for protein folding and aggregation

Tipo de participación: Póster

Congreso: Psi-k Summer School on "Simulation Approaches to Molecular and Cell Biology"

Lugar celebración: San Sebastián

Fecha: Septiembre, 2009

Autores: María Larriva y Antonio Rey

Título: Evaluación de modelos de simulación 'coarse-grained' para el estudio del proceso de plegamiento en proteínas con enlaces disulfuro

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: VI Reunión de la Red Temática Nacional sobre "Estructura y Función de Proteínas"

Lugar celebración: Madrid (España)

Fecha: Abril, 2010

Premio a la mejor comunicación oral

Autores: Marta Enciso y Antonio Rey

Título: Simulating hydrogen bonds: An intermediate resolution approach

Tipo de participación: Póster

Congreso: Prague Protein Spring International Workshop "From Peptides to Proteins"

Lugar celebración: Praga (Rep. Checa)

Fecha: Mayo, 2010

Autores: Marta Enciso y Antonio Rey

Título: Role of hydrogen bonds in peptidic systems from coarse-grained simulations

Tipo de participación: Póster

Congreso: IV Spanish Portuguese Biophysical Congress

Lugar celebración: Zaragoza (España)

Fecha: Julio, 2010

Autores: María Larriva y Antonio Rey

Título: When topology is not enough: Evaluating a new coarse-grained hybrid potential for protein folding

Tipo de participación: Póster

Congreso: IV Spanish Portuguese Biophysical Congress

Lugar celebración: Zaragoza (España)

Fecha: Julio, 2010

Autores: Marta Enciso y Antonio Rey

Título: Can we learn anything new from hydrogen bonds?

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: V National Conference BIFI 2011

Lugar celebración: Zaragoza (España)

Fecha: Febrero, 2011

Autores: Ramiro Perezan y Antonio Rey

Título: Influencia de la presión en la simulación del plegamiento de proteínas

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: XI Congreso de la Sociedad de Biofísica de España

Lugar celebración: Murcia (España)

Fecha: Junio, 2011

Autores: Marta Enciso y Antonio Rey

Título: Influencia de los enlaces de hidrógeno en el plegamiento de proteínas

Tipo de participación: Comunicación oral

Congreso: XI Congreso de la Sociedad de Biofísica de España

Lugar celebración: Murcia (España)

Fecha: Junio, 2011

Autores: Antonio Rey
Título: Modelos de simulación simples para problemas de plegamiento complejos
Tipo de participación: Conferencia invitada
Congreso: XI Congreso de la Sociedad de Biofísica de España
Lugar celebración: Murcia (España) Fecha: Junio, 2011

Autores: Marta Enciso y Antonio Rey
Título: Improving Gō models with hydrogen bonds for protein folding studies
Tipo de participación: Póster
Congreso: SIMBIOMA 2011 Conference on Molecular Simulations in Biosystems and Material Science
Lugar celebración: Konstanz (Alemania) Fecha: Septiembre, 2011

Autores: Marta Enciso y Antonio Rey
Título: Simple models for complex questions: The role of hydrogen bonds in folding processes
Tipo de participación: Póster
Congreso: Barcelona BioMed Conferences – “Macromolecular Dynamics”
Lugar celebración: Barcelona (España) Fecha: Octubre, 2011

Autores: Rui D.M. Travasso, Patricia F.N. Faísca, Andrea Parisi y Antonio Rey
Título: Why do protein folding rates correlate with metrics of native topology?
Tipo de participación: Póster
Congreso: Gordon Research Seminar on "Protein Folding Dynamics"
Lugar celebración: Ventura, CA (EE.UU.) Fecha: Enero, 2012

Autores: Marta Enciso y Antonio Rey
Título: Sequence-dependent effects in peptide folding by minimalist simulations
Tipo de participación: Presentación Oral
Congreso: International Congress of the Spanish Biophysical Society
Lugar celebración: Barcelona (España) Fecha: Julio, 2012

Autores: Ramiro Perezzan y Antonio Rey
Título: A new basic model for simulation the protein folding under pressure.
Tipo de participación: Presentación Oral
Congreso: IV National Conference BIFI 2013
Lugar celebración: Zaragoza (España) Fecha: Febrero, 2013

Autores: Vicente González Charro y y Antonio Rey
Título: Dynamics and thermodynamics of protein folding using repeat proteins
Tipo de participación: Póster
Congreso: XIII International Congress of the Spanish Biophysical Society
Lugar celebración: Valencia (España) Fecha: Junio, 2013

Autores: Ramiro Perezzan y y Antonio Rey
Título: Evaluating a new model for simulating protein folding under hydrostatic pressure

Tipo de participación: Presentación Oral
Congreso: XIII International Congress of the Spanish Biophysical Society

Lugar celebración: Valencia (España)

Fecha: Junio, 2013

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2.º caso.

Tesis doctorales dirigidas

TITULO: EVALUACIÓN DE POTENCIALES DE PLEGAMIENTO DE PROTEÍNAS CON ALGORITMOS GENÉTICOS

DOCTORANDO: DAVID DE SANCHO SÁNCHEZ

UNIVERSIDAD: COMPLUTENSE DE MADRID *FACULTAD:* CC. QUÍMICAS

AÑO: 2007 *CALIFICACION:* Sobresaliente "cum laude"

TITULO: POTENCIALES BASADOS EN TOPOLOGÍA PARA EL ESTUDIO DE LAS TRANSICIONES DE PLEGAMIENTO Y AGREGACIÓN DE PROTEÍNAS

DOCTORANDO: LIDIA PRIETO FRÍAS

UNIVERSIDAD: COMPLUTENSE DE MADRID *FACULTAD:* CC. QUÍMICAS

AÑO: 2008 *CALIFICACION:* Sobresaliente "cum laude"

TITULO: ESTRUCTURA NATIVA Y SECUENCIA EN EL PROCESO DE PLEGAMIENTO DE PROTEÍNAS GLOBULARES

DOCTORANDO: MARÍA LARRIVA HORMIGOS

UNIVERSIDAD: COMPLUTENSE DE MADRID *FACULTAD:* CC. QUÍMICAS

AÑO: 2010 *CALIFICACIÓN:* Sobresaliente "cum laude"

TITULO: MODELOS DE INTERACCIÓN DE ENLACE DE HIDRÓGENO PARA LA SIMULACIÓN DEL PLEGAMIENTO Y LA AGREGACIÓN DE PROTEÍNAS

DOCTORANDO: MARTA ENCISO CARRASCO

UNIVERSIDAD: COMPLUTENSE DE MADRID *FACULTAD:* CC. QUÍMICAS

AÑO: 2012 *CALIFICACIÓN:* Sobresaliente "cum laude"

1 Tesis Doctoral adicional en trámite de lectura, en la Facultad de C.C. Químicas de la Universidad Complutense de Madrid:

D. Ramiro Perezzan Rodríguez. Título: "Modelos simples para estudiar el efecto de la presión en el plegamiento de proteínas". Lectura estimada: mayo 2014.

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2.º caso.

Experiencia en organización de actividades de I+D+i

Organización de congresos, seminarios, jornadas, etc., científico-tecnológicos

Título: Protein Design: From Experiments to Computers

Tipo de actividad: Secretario del Curso de Verano de la UCM Ámbito: Nacional

Fecha: Julio, 1994 – El Escorial (España)

Título: BIFI 2004. I International Conference. "Biology after the Genome: A Physical View"

Tipo de actividad: Miembro del Comité Organizador Ámbito: Congreso Internacional

Fecha: Febrero, 2004 – Zaragoza (España)

Otros méritos o aclaraciones que se desee hacer constar
(utilice únicamente el espacio equivalente a una página)

4 Sexenios de Investigación reconocidos (1987-1992; 1993-1998; 1999-2004; 2005-2010)

5 Quinquenios Docentes reconocidos (1987-1991; 1992-1996; 1997-2001; 2002-2006; 2006-2011)

Director de 4 Tesinas de Licenciatura, 10 Proyectos de Fin de Carrera y 5 Trabajos Fin de Grado desde 1996.

Director de 3 Trabajos de Investigación para la obtención del DEA.

Director de 2 Trabajos de Fin de Máster en los tres últimos años.

Tutor del trabajo de investigación los siguientes investigadores que han realizado estancias postdoctorales en el grupo de investigación:

- Ma Fernanda Rey-Stolle Valcarce. Estancia 03/2007 – 10/2007. Actualmente es profesora en el Departamento de Química y Bioquímica, Facultad de Farmacia, Universidad San Pablo-CEU de Madrid.
- Sebastián Andújar. Estancia 09/2013 – 12/2013. Actualmente es profesor adjunto en el Departamento de Química, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia, Universidad Nacional de San Luis, Argentina.

Miembro adjunto del "Instituto de Biocomputación y Física de Sistemas Complejos" (BIFI) de la Universidad de Zaragoza

Miembro de la Sociedad Española de Biofísica

Censor de las siguientes revistas científicas:

- The Journal of Chemical Physics (EE.UU.).
- Macromolecular Theory and Simulations (Alemania).
- Macromolecules (EE.UU.).
- Biophysical Chemistry (EE.UU.)
- Biophysical Journal (EE.UU.)
- European Biophysics Journal (Alemania)
- Journal of the American Chemical Society (EE.UU.)
- Proteins (EE.UU.)



MINISTERIO DE CIENCIA Y TECNOLOGÍA

Secretaría de Estado de Política Científica y Tecnológica
Dirección General de Investigación

Curriculum vitae

Nombre: Mariona Sodupe Roure

Fecha: Marzo 2014

Apellidos : SODUPE ROURE

Nombre: MARIONA

DNI: :

Fecha de nacimiento :

Sexo: M

Situación profesional actual

Organismo: Universidad Autónoma de Barcelona

Facultad, Escuela o Instituto: Ciencias

Depto./Secc./Unidad estr.: Química

Dirección postal: Bellaterra 08193

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 93-5813031

Fax: 93-5812920

Correo electrónico: mariona@klingon.uab.es

Especialización (Códigos UNESCO): 2307

Categoría profesional: Catedrática de Universidad

Fecha de inicio: 10/11/08

Situación administrativa

Plantilla

Contratado

Interino

Becario

Otras situaciones especificar:

Dedicación

A tiempo completo

A tiempo parcial

Líneas de investigación

Breve descripción, por medio de palabras claves, de la especialización y líneas de investigación actuales.

Metal-biomolecule interactions, Redox properties, Amyloid, Catalysis, Silica based materials, Prebiotic Chemistry, DFT, Molecular Dynamics

Formación Académica

Titulación Superior	Centro	Fecha
Licenciada en Ciencias Químicas	Universidad Autónoma de Barcelona	Junio-1985
Grado de Licenciatura	Universidad Autónoma de Barcelona	Marzo-1987

Doctorado	Centro	Fecha
Doctora en Ciencias Químicas	Universidad Autónoma de Barcelona	Abril-1990

Actividades anteriores de carácter científico profesional

Puesto	Institución	Fechas
Ayudante de Universidad	Universidad Autónoma de Barcelona	1-10-85/31-12-1985
Becaria Formación Personal Investigador	Universidad Autónoma de Barcelona	1-1-86/30-9-1988
Ayudante Escuela Universitaria	Universidad Autónoma de Barcelona	1-10-88/31-8-1990
Becaria Fulbright Postdoctoral	NASA Ames Research Center	1-9-90/31-8-1992
Titular de Escuela Universitaria Interina	Universidad Autónoma de Barcelona	15-9-92/11-3-1996
Titular de Universidad	Universidad Autónoma de Barcelona	12-3-1996/22-10-2008
Catedrática de Universidad	Universidad Autónoma de Barcelona	10/11/08

Idiomas (R = regular, B = bien, C = correctamente)

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Inglés	C	C	C
Francés	B	C	B
Catalán	C	C	C
Castellano	C	C	C

Participación en Proyectos de I+D financiados en Convocatorias públicas.

Título del proyecto:

Entidad financiadora:

Entidades participantes:

Duración, desde: hasta: Cuantía de la subvención:

Investigador responsable:

Número de investigadores participantes:

Título del proyecto:

Entidad financiadora:

Entidades participantes:

Duración, desde: hasta: Cuantía de la subvención:

Investigador responsable:

Número de investigadores participantes:

TITULO DEL PROYECTO: "Estudios teóricos de radicales y diradicales"

ENTIDAD FINANCIADORA: Comité Hispano Norteamericano

DURACION DESDE: 1986 HASTA: 1988

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Juan Bertrán

TITULO DEL PROYECTO: Reacciones químicas favorecidas por perturbaciones externas o por catalizadores homogéneos organometálicos"

ENTIDAD FINANCIADORA: CAYCYT PB86-0529

DURACION DESDE: 1987 HASTA: 1989

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Juan Bertrán

TITULO DEL PROYECTO: "Dienófilos α -carbonílicos cíclicos en reacciones de Diels Alder. Síntesis de carbociclos quirales polifuncionalizados"

ENTIDAD FINANCIADORA: DGICYT PB88-0241

DURACION DESDE: 1989 HASTA: 1992

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Antonio Oliva y Rosa Ortuño

TITULO DEL PROYECTO: Grupo de Química Teórica

ENTIDAD FINANCIADORA: CIRIT, Grups de recerca de qualitat GRQ 93-2079

DURACION DESDE: 1993 HASTA: 1995

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Antonio Oliva

TITULO DEL PROYECTO: "Estructura y reactividad de complejos de metales de transición. Interacción metal-ligando y activación molecular"

ENTIDAD FINANCIADORA: DGICYT PB92-0621 CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 14.000.000

DURACION DESDE: 1993 HASTA: 1996

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Antonio Oliva

TITULO DEL PROYECTO: Grupo de Química Teórica

ENTIDAD FINANCIADORA: DGR, programa de suport de Grups de recerca 1995 SGR-00401

DURACION DESDE: 1996 HASTA: 1997

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Antonio Oliva

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

TITULO DEL PROYECTO: "Estructura y reactividad de complejos metálicos. Aplicaciones en síntesis orgánica y en química ambiental"

ENTIDAD FINANCIADORA: DGESIC PB95-0640 CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 7.000.000 pts

DURACION DESDE: 1996 HASTA: 1999

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Antonio Oliva

TITULO DEL PROYECTO: Grupo de Química Teórica

ENTIDAD FINANCIADORA: DGR, programa de suport de Grups de recerca 1997 SGR-0004

DURACION DESDE: 1997 HASTA: 1999 CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 1.350.000 pts

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Antonio Oliva

TITULO DEL PROYECTO: "Estructura y reactividad de complejos metálicos. Aplicaciones en Química ambiental y en sistemas de interés bioquímico"

ENTIDAD FINANCIADORA: DGESIC PB98-0912

DURACION DESDE: 1999 HASTA: 2002 CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 10.500.000 pts

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Antonio Oliva

TITULO DEL PROYECTO: Grupo de estructura y reactividad Química

ENTIDAD FINANCIADORA: DGR, programa de suport de Grups de recerca 1999 SGR-00092

DURACION DESDE: 1999 HASTA: 2001 CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 3.100.000 pts

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Antonio Oliva

TITULO DEL PROYECTO: Estudio teórico de complejos bimetálicos de metales de transición

ENTIDAD FINANCIADORA: Programa de acciones integradas de investigación científica y técnica(Francia)

DURACION DESDE: 2001 HASTA: 2002 CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 1.060.000 pts

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Agustí Lledós

TITULO DEL PROYECTO: Grupo de estructura y reactividad Química

ENTIDAD FINANCIADORA: DGR, programa de suport de Grups de recerca 2001 SGR-00182

DURACION DESDE: 2001 HASTA: 2004 CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 7.000.000 pts

INVESTIGADOR PRINCIPAL: J. Bertran

TITULO DEL PROYECTO: Cationización e ionización de aminoácidos y péptidos

ENTIDAD FINANCIADORA: DURSI Programa de Distinción de la Generalitat de Catalunya para la promoción de la investigación universitaria

DURACION DESDE: 2001 HASTA: 2005 CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 20.000.000 pts

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Mariona Sodupe

TITULO DEL PROYECTO: Ionización y activación por cationes metálicos de sistemas de interés bioquímico. Estudios teóricos y de espectrometría de masas

ENTIDAD FINANCIADORA: MCyT (Proyecto coordinado BQU2002-04112-C02-01)

DURACION DESDE: 2002 HASTA: 2005 CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 114825 €

INVESTIGADOR PRINCIPAL: Mariona Sodupe

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

TITULO DEL PROYECTO: Activación de biomoléculas. Estudios computacionales y de espectrometría de masas
ENTIDAD FINANCIADORA: MEC (CTQ2005-08797-C02-02/)
DURACION DESDE: 2005 HASTA: 2008
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 85680 €
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Mariona Sodupe

TITULO DEL PROYECTO: Convocatoria de profesores e investigadores visitantes
ENTIDAD FINANCIADORA: Generalitat de Catalunya 2005PIV2-13
DURACION DESDE: 2006 HASTA: 2006 CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 4930 €
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Mariona Sodupe

TITULO DEL PROYECTO: Grup d'Estudis teòrics d'activació de biomolècules
ENTIDAD FINANCIADORA: Ajuts de suport de Grups de recerca 2005-SGR 00244
DURACION DESDE: 2005 HASTA: 2008
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 41200 €
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Mariona Sodupe

TITULO DEL PROYECTO: Viatge a l'interior de les molècules. Simulacions per entendre la química
ENTIDAD FINANCIADORA: ACDC (Ayudas para Actividades de comunicación y divulgación científica)
DURACION DESDE: 2007 HASTA: 2007
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 4000 €
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Mariona Sodupe

TITULO DEL PROYECTO: Researcher's Night
ENTIDAD FINANCIADORA: FP7-PEOPLE-NIGHT (No 228736). (Ayudas para Actividades de comunicación y divulgación científica)
DURACION DESDE: 2008 HASTA: 2008
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 12189 €
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Mariona Sodupe (Coordinadora de la UAB)

TITULO DEL PROYECTO: Activación de biomoléculas por cationes de metales de transición y por superficies silíceas.
ENTIDAD FINANCIADORA: MICINN CTQ2008-06381/BQU
DURACION DESDE: 2008 HASTA: 2011
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 111000 €
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Mariona Sodupe

TITULO DEL PROYECTO: Grup d'Estudis teòrics d'activació de biomolècules
ENTIDAD FINANCIADORA: Ajuts de suport de Grups de recerca 2009-SGR 000638
DURACION DESDE: 2008 HASTA: 2013
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 41200 €
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Mariona Sodupe

TITULO DEL PROYECTO: Estancias de profesores e investigadores extranjeros en régimen de año sabático en centros españoles 2011
ENTIDAD FINANCIADORA: MEC
DURACION DESDE: abril 2012 HASTA: agosto 2012
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 9500 €
INVESTIGADOR RESPONSABLE DEL GRUPO RECEPTOR: Mariona Sodupe
INVESTIGADOR EXTRANJERO: Piero Ugliengo

TITULO DEL PROYECTO: Estudios computacionales de estructura y reactividad química. Aplicación a sistemas de interés biológico.
ENTIDAD FINANCIADORA: MICINN CTQ2011-24847/BQU
DURACION DESDE: 2012 HASTA: 2015

CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 116000 €
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Mariona Sodupe

TITULO DEL PROYECTO: ICREA Academia
ENTIDAD FINANCIADORA: Institut Català Recerca i Estudis Avançats
DURACION DESDE: 2012 HASTA: 2016
CUANTÍA DE LA SUBVENCIÓN: 200000 €
INVESTIGADOR PRINCIPAL: Mariona Sodupe

Publicaciones o Documentos Científico-Técnicos

(CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = "review", E = editor,
S = Documento Científico-Técnico restringido.)

Autores (p.o. de firma):

Título:

Ref. revista: Libro
Clave: Volumen: Páginas, inicial: final: Fecha:
Editorial (si libro):
Lugar de publicación:

1

AUTORES: M. Sodupe, A. Prenafeta, J. M. Lluch, A. Oliva and J. Bertrán

TITULO: "A theoretical study of the reaction of Fe⁺ (⁶D) with H₂"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* 166, 409-414 (1988)

CLAVE:A

2

AUTORES: E. Wunsch, M. Sodupe, J. M. Lluch, A. Oliva and J. Bertrán

TITULO: "Theoretical study of the addition of bromine atoms to monosubstituted and disubstituted derivatives of ethylene"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* 170, 225-232 (1988)

CLAVE:A

3

AUTORES: M. Sodupe, J. M. Lluch, A. Oliva, F. Illas and J. Rubio

TITULO: "Ground and low-lying states of FeH⁺ as derived from ab initio self-consistent-field and configuration interaction calculations"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Chem Phys* 90, 6436-6442 (1989)

CLAVE:A

4

AUTORES: M. Sodupe, J. M. Lluch, A. Oliva and J. Bertrán

TITULO: "Theoretical study of the conformational preferences in the Cl₄W=CH₂ complex"

REF REVISTA/LIBRO: *Organometallics* 8, 1837-1841 (1989)

CLAVE:A

5

AUTORES: M. Sodupe, A. Oliva, J. Bertrán and J. J. Dannenberg

TITULO: "An AM1 and MNDO theoretical study of the Diels Alder reaction between β -angelica lactone and cyclopentadiene"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Org. Chem.* 54, 2488-2490 (1989)

CLAVE:A

6

AUTORES: M. Sodupe, E. Wunsch, J. M. Lluch, A. Oliva and J. Bertrán

TITULO: "MNDO study of the radical addition of hydrogen halides to ethylene and propene"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* 205, 213-221 (1990)

CLAVE: A

7

AUTORES: M. Sodupe, J. M. Lluch, A. Oliva, F. Illas and J. Rubio

TITULO: "Ab initio study of the ground and low-lying states of FeH"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Chem Phys* 92, 2478-2480 (1990)

CLAVE:A

8

AUTORES: M. Sodupe, J. M. Lluch, A. Oliva, F. Illas and J. Rubio

TITULO: "An ab initio study of the collinear reaction of Fe⁺ (⁴F) and Fe⁺ (⁶D) with H₂"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Chem. Phys.* 94, 4352-4355 (1991)

CLAVE: A

9

AUTORES: M. Sodupe, J. M. Lluch, A. Oliva and J. Bertrán

TITULO: "Ab initio study of the reaction between Cl₄Mo=CH₂ and ethylene"

REF REVISTA/LIBRO: *New J. Chem.* 15, 321-325 (1991)

CLAVE: A

10

- AUTORES: V. Branchadell, M. Sodupe, R. M. Ortuño, A. Oliva D., Gómez-Pardo, A. Guingant and J. D'Angelo
TITULO: "Diels Alder cycloadditions of electron-rich, electron deficient and push-pull dienes with cyclic dienophiles: High pressure induced reactions and theoretical calculations"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Org. Chem.* 56, 4135-4141 (1991) CLAVE: A
-
- 11
AUTORES: M. Sodupe, J. M. Lluch, A. Oliva and J. Bertrán
TITULO: "An ab initio study of the reaction between $\text{Cl}_4\text{W}=\text{CH}_2$ and ethylene"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* 251, 37-47 (1991) CLAVE: A
-
- 12
AUTORES: M. Sodupe and C. W. Bauschlicher, Jr.
TITULO: "Al⁺-ligand binding energies"
REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Phys. Lett.* 181, 321-326 (1991) CLAVE: A
-
- 13
AUTORES: Y. Huang, Y. D. Hill, M. Sodupe, C. W. Bauschlicher, Jr and B. S. Freiser
TITULO: "Chemistry of scandium-benzyne ion in the gas phase"
REF REVISTA/LIBRO: *Inorg. Chem.* 30, 3822-3829 (1991) CLAVE: A
-
- 14
AUTORES: M. Sodupe and C. W. Bauschlicher, Jr.
TITULO: "Theoretical study of the bonding of the first- and second- row transition metal positive ions to acetylene"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem.* 95, 8640-8645 (1991) CLAVE: A
-
- 15
AUTORES: S. R. Langhoff, C. W. Bauschlicher, Jr., H. Partridge and M. Sodupe
TITULO: "Theoretical study of one and two ammonia molecules bound to the first-row transition metal ions"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem.* 95, 10677-10681 (1991) CLAVE: A
-
- 16
AUTORES: M. Sodupe, C. W. Bauschlicher, Jr. and H. Partridge,
TITULO: "The metal-ligand binding energies for $\text{Sr}(\text{H}_2\text{O})_n^+$ "
REF REVISTA/LIBRO: *J. Chem. Phys.* 95, 9422-9423 (1991) CLAVE: A
-
- 17
AUTORES: M. Sodupe, C. W. Bauschlicher, Jr., S. R. Langhoff and H. Partridge
TITULO: "Theoretical study of the bonding of the first-row transition metal positive ions to ethylene"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem.* 96, 2118-2122 (1992) CLAVE: A
-
- 18
AUTORES: M. Sodupe, Charles W. Bauschlicher, Jr., Timothy J. Lee
TITULO: "The calculation of the vibrational frequencies of CuCO^+ , NiCO and CuCH_3 "
REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Phys. Lett.* 189, 266-272 (1992) CLAVE: A
-
- 19
AUTORES: C. W. Bauschlicher, Jr., Mariona Sodupe and Harry Partridge
TITULO: "A theoretical study of the positive and dipositive ions of $\text{M}(\text{NH}_3)_n$ and $\text{M}(\text{H}_2\text{O})_n$ for M= Mg, Ca or Sr"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Chem. Phys.* 96, 4453-4463 (1992) CLAVE: A
-
- 20
AUTORES: Harry Partridge, C. W. Bauschlicher, Jr., Mariona Sodupe and Stephen R. Langhoff
TITULO: Comment on "An ab initio study of the ionization of sodium superoxide"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Chem. Phys.* 96, 7871-7871 (1992) CLAVE: A
-
- 21
AUTORES: Mariona Sodupe, Charles W. Bauschlicher, Jr. and Harry Partridge
TITULO: "A theoretical study of $\text{Mg}(\text{CO}_2)_n^+$ and $\text{Sr}(\text{CO}_2)_n^+$ for n=1 and 2 and Mg_2CO_2^+ "
REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Phys. Lett.* 192, 185- 194 (1992) CLAVE: A
-
- 22
AUTORES: Harry Partridge, Charlie W. Bauschlicher, Jr., Mariona Sodupe and Stephen R. Langhoff
TITULO: "Theoretical determination of the alkali-O₂ bond energies"
REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Phys Lett.* 195, 200- 206 (1992) CLAVE: A
-
- 23
AUTORES: Mariona Sodupe and Charlie W. Bauschlicher

- TITULO: "A theoretical study of the spectroscopy of MgH_2O^+ and MgCH_3OH^+ "
REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Phys Lett.* 195, 494-499 (1992). CLAVE: A
-
- 24
AUTORES: Yongqing Huang, Y. Dorothy Hill, Mariona Sodupe, Charles W. Bauschlicher and Ben S. Freiser
TITULO: "Gas phase chemistry of $\text{Sc}(\text{CH}_3)_2^+$ with alkenes: Activation of allylic CH bonds by a d^0 system and the migratory insertion of C=C bonds into Sc^+-CH_3 bonds."
REF REVISTA/LIBRO: *J. Am. Chem. Soc.* 114, 9106-9111 (1992) CLAVE: A
-
- 25
AUTORES: Charles W. Bauschlicher Jr., Harry Partridge, Mariona Sodupe and Stephen R. Langhoff
TITULO: "Theoretical study of the alkaline-earth superoxides BeO_2 through SrO_2 "
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem.* 96, 9259-9264 (1992) CLAVE: A
-
- 26
AUTORES: Charles W. Bauschlicher Jr., Mariona Sodupe, Harry Partridge and Stephen R. Langhoff
TITULO: "Theoretical study of the $^2A_2-^2B_2$ separation of the alkali superoxides"
REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Phys. Lett.* 197, 213-217 (1992). CLAVE: A
-
- 27
AUTORES: Charles W. Bauschlicher, Jr., Stephen R. Langhoff, Harry Partridge and Mariona Sodupe
TITULO: "A determination of the structure and bond energies of Ni-O_2 and Cu-O_2 "
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem.* 97, 856-859 (1993) CLAVE: A
-
- 28
AUTORES: Mariona Sodupe and Charles W. Bauschlicher
TITULO: "The bonding in the low-lying states of MgO_2^+ "
REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Phys. Lett.* 203, 215-219 (1993) CLAVE: A
-
- 29
AUTORES: Jr., Mariona Sodupe, Charles W. Bauschlicher
TITULO: "The bonding in FeC_5H_5^+ "
REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Phys. Lett.* 207, 19-22 (1993) CLAVE: A
-
- 30
AUTORES: Mariona Sodupe Charles W. Bauschlicher, Jr.
TITULO: "A Theoretical study of the spectroscopy of SrH_2O^+ and SrNH_3^+ "
REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Phys. Lett.* 212, 624-630 (1993) CLAVE: A
-
- 31
AUTORES: Charles W. Bauschlicher, Jr., Mariona Sodupe
TITULO: "A study of the ground and low-lying states of MgCH_4^+ "
REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Phys. Lett.* 214, 489-494 (1993) CLAVE: A
-
- 32
AUTORES: Mariona Sodupe, Charles W. Bauschlicher, Jr.
TITULO: "A study of the ground and low-lying states of MgC_2H_2^+ and MgC_2H_4^+ "
REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Phys.* 185, 163-171 (1994) CLAVE: A
-
- 33
AUTORES: Mariona Sodupe, Antonio Oliva, Juan Bertran
TITULO: "A theoretical study of the ionization of $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2\text{O}$, $\text{H}_2\text{O}-\text{NH}_3$ and $\text{FH}-\text{H}_2\text{O}$ hydrogen bonded molecules"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Am. Chem. Soc.* 116, 8249-8258 (1994) CLAVE: A
-
- 34
AUTORES: Mariona Sodupe, Vicenç Branchadell, Antonio Oliva
TITULO: "On the bonding in Sc-CO_2 "
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem.* 99, 8567-8571 (1995) CLAVE: A
-
- 35
AUTORES: Charles W. Bauschlicher, Jr., Mariona Sodupe
TITULO: "What is the structure of FeC_5H_6^+ "
REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Phys. Lett.* 240, 526-532 (1995) CLAVE: A
-

36

AUTORES: Mariona Sodupe, Antonio Oliva, Juan Bertran

TITULO: "A theoretical study of the ionization of H₂S-H₂S, H₂S-PH₃ and ClH-H₂S hydrogen bonded molecules"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Am. Chem. Soc.* 117, 8416-8421 (1995)

CLAVE: A

37

AUTORES: Luis Rodríguez-Santiago, Vicenç Branchadell, Mariona Sodupe

TITULO: "Theoretical study of the bonding of NO₂ to Cu and Ag"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Chem. Phys.* 103, 9738-9743 (1995)

CLAVE: A

38

AUTORES: Mariona Sodupe, Vicenç Branchadell, Antonio Oliva

TITULO: "Theoretical study of the ScCO₂→OScCO reaction

REF REVISTA/LIBRO: *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)* 371, 79-84 (1996)

CLAVE: A

39

AUTORES: Luis Rodríguez-Santiago, Mariona Sodupe, Vicenç Branchadell

TITULO: "Comparison of density functional and coupled cluster methods in the study of metal-ligand systems :Sc-CO₂ and Cu-NO₂

REF REVISTA/LIBRO: *J. Chem. Phys.* 105, 9966-9971 (1996)

CLAVE: A

40

AUTORES: V. Branchadell, M. Sodupe, A. Oliva and J. Bertran

TITULO: "Contribution of quantum chemistry to the study of dienes and polyenes"

REF REVISTA/LIBRO: *The Chemistry of dienes and polyenes*.1,1,(1997)

CLAVE: CL

41

AUTORES: E. J. Baerends, V. Branchadell, M. Sodupe

TITULO: "Atomic reference energies for density functional calculations"

REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Phys. Lett.* 265, 481-489 (1997)

CLAVE: A

42

AUTORES: Mariona Sodupe, Vicenç Branchadell, Antonio Oliva and Juan Bertran

TITULO: "Theoretical study of ScCO₂⁺"

REF REVISTA/LIBRO: *Int. J. Quantum Chem.* 63, 523-528 (1997)

CLAVE: A

43

AUTORES: M. Sodupe, R. Rios, V. Branchadell, T. Nicholas, A. Oliva, J.J. Dannenberg

TITULO: "A theoretical study of the endo/exo selectivity of the Diels Alder reaction between cyclopropene and butadiene"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Am. Chem. Soc.* 119, 4232-4238 (1997)

CLAVE: A

44

AUTORES: Mariona Sodupe, Antonio Oliva, Juan Bertrán

TITULO: "Theoretical study of the ionization of phenol-water and phenol-ammonia hydrogen bonded complexes"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A* 101, 9142-9151 (1997)

CLAVE: A

45

AUTORES: Mariona Sodupe, Vicenç Branchadell, Marzio Rosi and Charles W. Bauschlicher

TITULO: "Theoretical study of M⁺-CO₂ and OM⁺-CO systems for first transition row metal atoms"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A* 101, 7854-7859 (1997)

CLAVE: A

46

AUTORES: Luis Rodríguez-Santiago, Mariona Sodupe and Vicenç Branchadell

TITULO: "Coordination of NO₂ to alkaline-earth metals. A theoretical study"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A* 102, 630-635 (1998)

CLAVE: A

47

AUTORES: Luis Rodríguez Santiago, Marek Sierka, Vicenç Branchadell, Mariona Sodupe, Joachim Sauer

TITULO: "Coordination of Cu⁺ ions to zeolite frameworks strongly enhances their ability to bind NO₂. An ab initio density functional study"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Am. Chem. Soc.* 120, 1545-1551 (1998)

CLAVE: A

48

AUTORES: Luis Rodríguez-Santiago, X. Solans-Monfort, Mariona Sodupe, Vicenç Branchadell

TITULO: "Coordination of NO₂ to Cu and Mg in M(NO₂)₂ complexes. A theoretical study"

REF REVISTA/LIBRO: *Inorg. Chem.* 37, 4512-4517 (1998)

CLAVE: A

49

- AUTORES: Juan Bertran, Antonio Oliva, Luis Rodríguez-Santiago, Mariona Sodupe
TITULO: "Single versus double proton transfer reactions in Watson-Crick Base pair radical cations. A theoretical study"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Am. Chem. Soc.* 120, 8159-8167 (1998) CLAVE: A
-
- 50
AUTORES: Juan Bertran, Vicenç Branchadell, Antonio Oliva, Mariona Sodupe
TITULO: "Pericyclic reactions: The Diels Alder reaction"
REF REVISTA/LIBRO: *Encic. Comp. Chem. Wiley NY 2030* (1998) CLAVE: A
-
- 51
AUTORES: J. Bertran, A. Oliva, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe
TITULO: "Potential energy profiles of proton transfer processes in cationic clusters"
REF REVISTA/LIBRO: *Actualidades de Fisico Química Organica*, 91 (1998) CLAVE: A
-
- 52
AUTORES: Mariona Sodupe, Luis Rodríguez-Santiago, Juan Bertran, Evert J. Baerends
TITULO: "The ground state of (H₂O)₂⁺. DFT versus post-Hartree Fock methods"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A* 103, 166-70 (1999) CLAVE: A
-
- 53
AUTORES: J. Bertran, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe
TITULO: "The different nature of the bonding in Cu⁺-glycine and Cu²⁺- glycine"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. B*, 103, 2310-2317 (1999) CLAVE: A
-
- 54
AUTORES: Marie-Pierre Habas, Franca Mele, Mariona Sodupe, Francesc Illas
TITULO: "Density functional cluster model study of bonding and coordination modes of CO₂ on Pd(111)"
REF REVISTA/LIBRO: *Surface Science*, 431, 208-219 (1999) CLAVE: A
-
- 55
AUTORES: L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe, A. Oliva, J. Bertran
TITULO: "Hydrogen atom or proton transfer in neutral and single positive ions of salicylic acid and related compounds"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Am. Chem. Soc.*, 121, 8882-8890 (1999) CLAVE: A
-
- 56
AUTORES: L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe, A. Oliva, J. Bertran
TITULO: "Intramolecular proton transfer in glycine radical cation"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem A*, 104, 1256-1261 (2000) CLAVE: A
-
- 57
AUTORES: S. Solans-Monfort, Vicenç Branchadell, M. Sodupe
TITULO: "Theoretical Study of the Structure of ZCu(NO₂)(NO). A proposed intermediate in the NO_x decomposition by Cu-ZSM5"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem B*, 104, 3225-3230 (2000) CLAVE: A
-
- 58
AUTORES: S. Pulkkinen, M. Noguera, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe, J. Bertran
TITULO: "Gas phase intramolecular proton transfer in Cationized glycine and Chlorine substituted derivatives (M-Gly, M = Na⁺, Mg²⁺, Ni⁺, Cu⁺ and Cu²⁺: Existence of zwitterionic structures?"
REF REVISTA/LIBRO: *Chemistry-A European Journal*, 6, 4393-4399 (2000) CLAVE: A
-
- 59
AUTORES: J. Bertrán, V.Branchadell, M. Moreno, M. Sodupe
TITULO: "Química Cuántica: Fundamentos y Aplicaciones"
REF REVISTA/LIBRO: Ed. Síntesis, Madrid (2000) CLAVE: L
-
- 60
AUTORES: M. Nogera, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe, J. Bertran
TITULO: "Protonation of glycine, serine and cysteine: Conformations, proton affinities and intrinsic basicities"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Mol. Struct. (THEOCHEM)*, 537, 307-318 (2001)
(Número dedicado al Prof. Fraga) CLAVE: A
-
- 61
AUTORES: L. Rodríguez-Santiago, O.Vendrell, I. Tejero, M. Sodupe, J. Bertran
TITULO: "Solvent assisted catalysis in the enolization of acetaldehyde radical cation"
REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Phys. Lett.*, 334, 112-118 (2001) CLAVE: A
-
- 62
AUTORES: S. Simon, J. Bertran, M. Sodupe

- TITULO: "Effect of counterpoise correction on the geometries and vibrational frequencies of hydrogen bonded systems"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem A*, 105, 4359-4364 (2001) CLAVE: A
-
- 63
AUTORES: L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe, J. Tortajada
TITULO: "Gas phase reactivity of Ni⁺ with Glycine"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem B*, 105, 5340-5347 (2001) CLAVE: A
-
- 64
AUTORES: J. Bertran, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe
TITULO: "Inter and Intramolecular Proton Transfer Processes in ionized Hydrogen Bonded Systems"
REF REVISTA/LIBRO: *Trends in Physical Chemistry*, 8, 1-19 (2001) CLAVE: A
-
- 65
AUTORES: X. Solans-Monfort, V. Branchadell, M. Sodupe
TITULO: "On the NO decomposition by Cu-ZSM5 through the ZCu(NO₂)(NO) and ZCuN₂O₃ intermediates"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. B* 106, 1372-1379, (2002) CLAVE: A
-
- 66
AUTORES: S. Simon, M. Sodupe, J. Bertran
TITULO: "Isomerization versus fragmentation of glycine radical cation in gas phase"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A* 106, 5697-5702, (2002) CLAVE: A
-
- 67
AUTORES: J. Bertran, M. Noguera, M. Sodupe
TITULO: "Protonation vs ionization on intermolecular proton transfer reactions in Guanine-Cytosine Watson Crick base pair"
REF REVISTA/LIBRO: *Afinidad*, Numero especial 500, 59, 470-478 (2002) CLAVE: A
-
- 68
AUTORES: X. Solans Monfort, J. Bertran, V. Branchadell, M. Sodupe
TITULO: "Keto-Enol Isomerization of Acetaldehyde in HZSM5. A theoretical study using the ONIOM2 method"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. B*, 106, 1020-10226 (2002) CLAVE: A
-
- 69
AUTORES: J. Bertran, M. Noguera, M. Sodupe
TITULO: "Effects of ionization and cationization on intermolecular proton transfer reactions in DNA base pairs"
REF REVISTA/LIBRO: *Fundamental World of Quantum Chemistry. A tribute volume to P. O. Lowdin. Vol. II*, 557-581 (2003) CLAVE: CL
-
- 70
AUTORES: A. Liedós, M. Moreno-Mañas, M. Sodupe, A. Vallibera, I. Mata, B. Martínez, E. Molins
TITULO: "Bent and Linear Forms of the (n-Oxo)bis[trichloroferrate(III)]Dianion: An intermolecular effect-Structural, Electronic and Magnetic Properties.
REF REVISTA/LIBRO: *Eur. J. Inorg. Chem.*, 4187-4189 (2003) CLAVE: A
-
- 71
AUTORES: X. Solans-Monfort, M. Sodupe, V. Branchadell
TITULO: "Spin forbidden N₂O dissociation in Cu-ZSM5"
REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Phys. Lett.*, 368, 242-246 (2003) CLAVE: A
-
- 72
AUTORES: A. Gil, J. Bertrán, M. Sodupe
TITULO: "Gas Phase Dissociation Energies of Saturated Ahn⁺ Radical Cations and AH_n Neutrals (A = Li-F, Na-Cl): Dehydrogenation, Deprotonation, and Formation of AH_{n-2}⁺ - H₂ Complexes"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Am. Chem. Soc.*, 125, 7461-7469, (2003) CLAVE: A
-
- 73
AUTORES: L. Rodríguez-Santiago, M. Noguera, M. Sodupe, J. Y. Salpin, J. Tortajada
TITULO: "Gas phase reactivity of Ni⁺ with urea. Mass spectrometry and Theoretical studies"
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A*, 107, 9865-9874 (2003) CLAVE: A
-
- 74
AUTORES: E. Constantino, X. Solans-Monfort, M. Sodupe, J. Bertran
TITULO: "Basic and acidic bifunctional catalysis: application to the tautomeric equilibrium of formamide"
REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Phys.* 295, 151-158 (2003) CLAVE: A
-

75

AUTORES: M. Noguera, J. Bertrán, M. Sodupe

TITULO: "A quantum chemical study of Cu²⁺ interacting with Guanine-Cytosine Base pair. Electrostatic and Oxidative effects on Intermolecular proton transfer processes"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A*, 108, 333 (2004)

CLAVE: A

76

AUTORES: S. Simon, M. Sodupe, J. Bertran

TITULO: "Water catalyzed isomerization of glycine radical cation. From hydrogen atom transport to proton transport catalysis"

REF REVISTA/LIBRO: *Theor. Chem. Acc.*, 111, 217 (2004)

CLAVE: A

77

AUTORES: Xavier Solans-Monfort, Vicenc Branchandell, Mariona Sodupe, Claudio Zicovich-Wilson, Evgueny Gribov, Giuseppe Spoto, Claudia Busco, Piero Ugliengo

TITULO: "Can Cu⁺-exchanged Zeolites Store Molecular Hydrogen? An Ab-initio Periodic Study Compared with Low Temperature FTIR"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. B*, 108, 8278 (2004)

CLAVE: A

78

AUTORES: Jordi Poater, Miquel Solà, Albert Rimola, L. Rodríguez Santiago, M. Sodupe

TITULO: "Ground and low lying electronic states of Cu²⁺-H₂O. A difficult case for density functional methods"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A*, 108, 6072 (2004)

CLAVE: A

79

AUTORES: M. Noguera, M. Sodupe, J. Bertran

TITULO: "Effects of protonation on proton transfer processes in Guanine-Cytosine Watson-Crick base pair"

REF REVISTA/LIBRO: *Theor. Chem. Acc.* 112, 318 (2004)

CLAVE: A

80

AUTORES: Adrià Gil, Mariona Sodupe, Joan Bertran

TITULO: "Unusual hydrogen bonds in [AH₃-H₃O]⁺ radical cations (A = C, Si, Ge, Sn and Pb) Single-electron hydrogen bond, proton-hydride hydrogen bond and formation of [H₂AOH₂]⁺-H₂ complexes"

REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Phys. Lett.*, 395, 27, (2004)

CLAVE: A

81

AUTORES: Lluís Blancafort, Joan Bertrán, Mariona Sodupe

TITULO: "Triplet (π, π) Reactivity of the Guanine-Cytosine DNA Base Pair: Benign Deactivation versus Double Tautomerization via Intermolecular Hydrogen Transfer"

REF REVISTA/LIBRO: *J. Am. Chem. Soc.*, 126, 12770 (2004)

CLAVE: A

82

AUTORES: X. Solans Monfort, V. Branchadell, M. Sodupe, M. Sierka, J. Sauer

TITULO: "Electron hole formation in acidic zeolite catalysts."

REF REVISTA/LIBRO: *J. Chem. Phys.* 121, 6034 (2004)

CLAVE: A

83

AUTORES: J. E. Spomer, P. J. Sanz Miguel, L. Rodríguez-Santiago, M. Krumm, M. Sodupe, J. Spomer, B. Lippert

TITULO: "Metal mediated Deamination of Cytosine. Experiment and DFT calculations"

REF REVISTA/LIBRO: *Angew. Chem. Int. Ed.* 43, 5396 (2004)

CLAVE: A

84	AUTORES: I. Georgieva, N. Trendafilova, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe TITULO: "Coordination properties of the oxime analogue of glycine to Cu(II)" REF REVISTA/LIBRO: <i>J. Phys. Chem. A</i> 109 5668 (2005)	CLAVE: A
85	AUTORES: A. Rimola, S. Tosoni, M. Sodupe, P. Ugliengo TITULO: "Peptide bond formation activated by the interplay of Lewis and Brønsted catalysts" REF REVISTA/LIBRO: <i>Chem. Phys. Lett.</i> 408, 295 (2005)	CLAVE: A
86	AUTORES: E. Constantino, A. Rimola, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe TITULO: "Coordination properties of glycyglycine to Cu ⁺ , Ni ⁺ and Co ⁺ . Influence of metal cation electronic configuration" REF REVISTA/LIBRO: <i>N. J. Chem.</i> 29, 1585 (2005)	CLAVE: A
87	AUTORES: X. Solans-Monfort, M. Sodupe, O. Mo, M. Yáñez, J. Elguero TITULO: "Hydrogen Bond versus Proton Transfer in HZSM5 Zeolite. A theoretical Study" REF REVISTA/LIBRO: <i>J. Phys. Chem. B</i> 109, 19301 (2005)	CLAVE: A
88	AUTORES: M. Tristany, J. Courmarcel, P. Dieudonne, M. Moreno-Manas, R. Pleixats, A. Rimola, M. Sodupe and S. Villarroja TITULO: Palladium Nanoparticles Entrapped in Heavily Fluorinated Compounds REF REVISTA/LIBRO: <i>Chem. Mat.</i> , <u>18</u> , 716-722 (2006)	CLAVE: A
89	AUTORES: A. Rimola, S. Tosoni, M. Sodupe and P. Ugliengo, TITULO: Does silica surface catalyse peptide bond formation? New insights from first-principles calculations REF REVISTA/LIBRO: <i>ChemPhysChem</i> <u>7</u> , 157-163 (2006).	CLAVE: A
90	AUTORES: A. Rimola, M. Sodupe, J. Ros and J. Pons, TITULO: A theoretical study on PdII complexes containing hemilabile pyrazole-derived ligands REF REVISTA/LIBRO: <i>Eur. J. Inorg. Chem.</i> 447-454 (2006).	CLAVE: A
91	AUTORES: R. Rios-Font, J. Bertran, L. Rodríguez-Santiago and M. Sodupe TITULO: Effects of Ionization, Metal Cationization and Protonation on 2'-Deoxyguanosine: Changes on Sugar Puckering and Stability of the N-Glycosidic Bond REF REVISTA/LIBRO: <i>J. Phys. Chem. B</i> <u>110</u> , 5767-5772 (2006).	CLAVE: A
92	AUTORES: A. Gil, J. Bertrán, M. Sodupe TITULO: Effects of ionization on N-Glycyglycine peptide. Influence of intramolecular hydrogen bonds. REF REVISTA/LIBRO: <i>J. Chem. Phys.</i> 124, 154306 (2006)	CLAVE: A
93	AUTORES: A. Rimola, M. Sodupe, S. Tosoni, B. Civalleri, P. Ugliengo, TITULO: Interaction of Glycine with Isolated Hydroxyl Groups at the Silica Surface: First Principles B3LYP Periodic Simulation REF REVISTA/LIBRO: <i>Langmuir</i> , 22, 6593-6604(2006)	CLAVE: A
94	AUTORES: A. Rimola, M. Sodupe, J. Tortajada, L. Rodríguez-Santiago, TITULO: Gas Phase Reactivity of Cu ⁺ -aromatic Amino Acids. An Experimental and Theoretical Study, REF REVISTA/LIBRO: <i>Int. J. Mass. Spectrom.</i> 255, 60-69 (2006)	CLAVE: A
95	AUTORES: A. Rimola, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe, TITULO: Cation π interactions and oxidative effects on Cu ⁺ and Cu ²⁺ binding to Phe, Tyr, Trp and His amino acids. Insights from first principle calculations, REF REVISTA/LIBRO: <i>J. Phys. Chem. B</i> 110, 5767, (2006)	CLAVE: A
96		

AUTORES: M. Noguera, Blancafort, L., M. Sodupe, J. Bertran TITULO: Canonical Watson-Crick Base Pairs interactions in $p \rightarrow p^*$ Triplet states. REF REVISTA/LIBRO: <i>Mol. Phys.</i> 104, 925, (2006)	CLAVE: A
97 AUTORES : J. Bertran, L. Blancafort, M. Noguera, M. Sodupe TITULO: Proton transfers in DNA base pairs. Potential mutagenic processes REF REVISTA/LIBRO: <i>Computacional studies of RNA and DNA</i> , J. Sponer, F. Lankas Eds. Springer (2006)	CLAVE: L
98 AUTORES: M. Noguera, M. Sodupe, J. Bertran TITULO: Effects of protonation on proton transfer processes in Watson-Crick Adenine-Thymine base pair REF REVISTA/LIBRO: <i>Theoret. Chem. Acc.</i> 118, 113 (2007)	CLAVE: A
99 AUTORES: A. Gil, S. Simon, M. Sodupe, J. Bertran TITULO: Gas-phase proton-transport self-catalysed isomerisation of glutamine radical cation: The important role of the side-chain. REF REVISTA/LIBRO: <i>Theoret. Chem. Acc.</i> 118, 589 (2007)	CLAVE: A
100 AUTORES: A. Rimola, L. Rodriguez-Santiago, P. Ugliengo, M. Sodupe TITULO: Is the Peptide Bond Formation Activated by Cu^{2+} Interactions? Insights from Density Functional Calculations. REF REVISTA/LIBRO: <i>J. Phys. Chem. B</i> 111, 5740 (2007)	CLAVE: A
101 AUTORES: M. Noguera, V. Branchadell, E. Constantino, R. Rios-Font, M. Sodupe, L. Rodriguez-Santiago TITULO: On the Bonding of First-Row Transition Metal Cations to Guanine and Adenine Nucleobases. REF REVISTA/LIBRO: <i>J. Phys. Chem. A</i> 111, 9823 (2007)	CLAVE: A
102 AUTORES: Rios-Font, L. Rodriguez-Santiago, J. Bertran, M. Sodupe: TITULO: Influence of N7 Protonation on the Mechanism of the N-Glycosidic Bond Hydrolysis in 2'-Deoxyguanosine. A Theoretical Study. REF REVISTA/LIBRO: <i>J. Phys. Chem. B</i> 111, 6071 (2007)	CLAVE: A
103 AUTORES: A. Rimola, M. Sodupe, P. Ugliengo: TITULO: Aluminosilicate Surfaces as Promoters for Peptide Bond Formation: An Assessment of Bernal's Hypothesis by ab Initio Methods. REF REVISTA/LIBRO: <i>J. Am. Chem. Soc.</i> 129, 8333 (2007)	CLAVE: A
104 AUTORES: A. Gil, S. Simon, L. Rodríguez-Santiago, J. Bertran, M. Sodupe. TITULO: Influence of the Side Chain in the Structure and Fragmentation of Amino Acids radical Cations. REF REVISTA/LIBRO: <i>J. Chem. Theor. Comp.</i> 3, 2210 (2007)	CLAVE: A
105 AUTORES: A. Gil, S. Simon, J. Bertran, M. Sodupe. TITULO: How the site of ionisation influences side-chain fragmentation in histidine radical REF REVISTA/LIBRO: <i>Chem. Phys. Lett.</i> (2008), 451(4-6), 276-281	CLAVE: A
106 AUTORES: A. Rimola, E. Constantino, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe TITULO: Binding properties of Cu^{+2+} -(glycyl) _n glycine complexes (n=1-3) REF REVISTA/LIBRO: <i>J. Phys. Chem A.</i> (2008) 112, (15), 3444-3453.	CLAVE: A
107 AUTORES: M. Noguera, J. Bertran, M. sodupe TITULO: Cu^{2+} coordination to Adenine-Thymine base pair. effects on intermolecular proton transfer processes REF REVISTA/LIBRO: <i>J. Phys. Chem B.</i> (2008) 112, (15), 4817-4825	CLAVE: A

108

AUTORES: E. Constantino, J. Tortajada, M. Sodupe, L. Rodriguez-Santiago
TITULO: Coordination Properties of Lysine Interacting with Co(I) and Co(II). A Theoretical and Mass Spectrometry Study.
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A.* (2008) 112, (15), 12385-12392 CLAVE: A

109

AUTORES: P. Ugliengo, M. Sodupe, F. Musso, I. J. Bush, R. Orlando, R. Dovesi,
TITULO: Realistic Models of Hydroxylated Amorphous Silica Surfaces and MCM-41 Mesoporous Material Simulated by Large-scale Periodic B3LYP Calculation
REF REVISTA/LIBRO: *Adv. Mater.* (2008), 20, 4579-4583. CLAVE: A

110

AUTORES: A. Gil, J. Bertran, M. Sodupe,
TITULO: Ramachandran surfaces of N-formyl-glycine amide and N-formyl-alanine amide radical cations
REF REVISTA/LIBRO: *J. Comput. Chem* (2009), 12, 1771-1784 CLAVE: A

111

AUTORES: C. Rodriguez-Rodriguez, N. Sanchez de Groot, A. Rimola, A. Alvarez-Larena, V. Lloveras, J. Vidal-Gancedo, S. Ventura, J. Vendrell, M. Sodupe P. Gonzalez-Duarte
TITULO: Design, Selection, and Characterization of Thioflavin-Based Intercalation Compounds with Metal Chelating Properties for Application in Alzheimer's Disease
REF REVISTA/LIBRO: *J. Am. Chem. Soc.* (2009) 131 (4) 1436-1451 CLAVE: A

112

AUTORES: M. Guell, J.M. Luis, L. Rodriguez-Santiago, M. Sodupe, M. Sola
TITULO: Structure, Bonding, and Relative Stability of the Ground and Low-Lying Electronic States of CuO₂. The Role of Exact Exchange
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A.* (2009), 113 1308-1317 CLAVE: A

113

AUTORES: A. Rimola, P. Ugliengo, M. Sodupe
TITULO: Formation versus Hydrolysis of the Peptide Bond from a Quantum-mechanical Viewpoint: The Role of Mineral Surfaces and Implications for the Origin of Life
REF REVISTA/LIBRO: *Int. J. Mol. Sci.* (2009), 10, 746-760 CLAVE: A

114

AUTORES: A. Rimola, M. Sodupe, P. Ugliengo
TITULO: Affinity Scale for the Interaction of Amino Acids with Silica Surfaces
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. C.* (2009), 113, 5741-5750 CLAVE: A

115

AUTORES: M. Noguera, R. Ríos-Font, L. Rodríguez-Santiago, X. Solans-Monfort, A. Oliva, J. Bertran, M. Sodupe.
TITULO: Influence of pi-stacking on the N7 and O6 proton affinity of guanine
REF REVISTA/LIBRO: *Theoret. Chem. Acc.* (2009), 123, 105-111 CLAVE: A

116

AUTORES: E. Constantino, A. Rimola, M. Sodupe, L. Rodríguez-Santiago.
TITULO: Coordination of (Glycyl)(n)glycine (n=1-3) to Co⁺ and Co²⁺
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A.* (2009), 113, 8883-8892 CLAVE: A

117

AUTORES: P. Mignon, P. Ugliengo, M. Sodupe
TITULO: Theoretical Study of the Adsorption of RNA/DNA Bases on the External Surfaces of Na⁺-Montmorillonite
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. C* (2009) 113, 13741-13749 (Cover) CLAVE: A

118

AUTORES: F. Musso, M. Sodupe, M. Corno, P. Ugliengo
TITULO: H-Bond Features of Fully Hydroxylated Surfaces of Crystalline Silica Polymorphs: A Periodic B3LYP Study
REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. C.* (2009) 113, 17876-17884 CLAVE: A

119

AUTORES: Y. Pérez-Badell, X. Solans-Monfort, M. Sodupe, L. A. Montero
TITULO: A DFT periodic study on the interaction between O₂ and cation exchanged chabazite MCHA (M = H⁺, Na⁺ or Cu⁺): effects in the triplet-singlet energy gap
REF REVISTA/LIBRO: *Phys.Chem.Chem.Phys.* (2010) 12 442-452 CLAVE: A

120

AUTORES: P. Mignon, P. Ugliengo, M. Sodupe, E. Hernandez.
TITULO: Ab Initio Molecular Dynamics Study of the Hydration of Li⁺, Na⁺ and K⁺ Montmorillonite. Influence of isomorphic substitution

REF REVISTA/LIBRO: <i>Phys.Chem.Chem.Phys.</i> (2010) 12, 688-697	CLAVE: A
121	
AUTORES: C. Rodríguez-Rodríguez, A. Rimola, L. Rodríguez-Santiago, P. Ugliengo, A. Álvarez-Larena, H. Gutiérrez-de-Terán, M. Sodupe, P. González-Duarte	
TITULO: Crystal structure of thioflavin-T and its binding to amyloid fibrils: insights and implications at the molecular level.	
REF REVISTA/LIBRO: <i>Chem. Comm.</i> , 46, (2010) 1156-1158	CLAVE: A
122	
AUTORES: A. Rimola, M. Sodupe, P. Ugliengo	
TITULO: Deep-space glycine formation via Strecker-type reactions activated by ice water dust mantles. A computational approach	
REF REVISTA/LIBRO: <i>Phys.Chem.Chem.Phys.</i> (2010) 12,5285-5294	CLAVE: A
123	
AUTORES: J. R. Cucarull-Gonzalez, J. Hernando, R. Alibes, M. Figueredo, J. Font, J.; L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe	
TITULO: [2 + 2] Photocycloaddition of 2(5H)-Furanone to Unsaturated Compounds. Insights from First Principles Calculations and Transient-Absorption Measurements.	
REF REVISTA/LIBRO: <i>J. Org. Chem.</i> (2010), 75, 4392-4401.	CLAVE: A
124	
AUTORES: X. Solans-Monfort, R. Pleixats, M. Sodupe	
TITULO: DFT mechanistic study on diene metathesis catalyzed by Ru-based Grubbs-Hoveyda-type carbenes: the key role of π -electron density delocalization in the Hoveyda ligand.	
REF REVISTA/LIBRO: <i>Chem.Eur. J.</i> (2010), 16(24), 7331-7343	CLAVE: A
125	
AUTORES: X. Solans-Monfort, M. Sodupe, J. Eckert,	
TITULO: Origin of the Enhanced Interaction of Molecular Hydrogen with Extraframework Cu ⁺ and FeO ⁺ Cations in Zeolite Hosts. A Periodic DFT Study.	
REF REVISTA/LIBRO: <i>J. Phys. Chem. C</i> (2010), 114(32), 13926-13934.	CLAVE: A
126	
AUTORES: F. Musso, P. Ugliengo, X. Solans-Monfort, M. Sodupe	
TITULO: Periodic DFT Study of Radical Species on Crystalline Silica Surfaces.	
REF REVISTA/LIBRO: <i>J. Phys. Chem. C</i> (2010), 114(39), 16430-16438.	CLAVE: A
127	
AUTORES: R. Ríos-Font, M. Sodupe, L. Rodríguez-Santiago, P. Taylor	
TITULO: The Role of Exact Exchange in the Description of Cu ²⁺ -(H ₂ O) _n (n = 1-6) Complexes by Means of DFT Methods.	
REF REVISTA/LIBRO: <i>J. Phys. Chem. A</i> (2010) 114 (39), 10857-10863	CLAVE: A
128	
AUTORES: L. Rodríguez-Santiago, M. Noguera, J. Bertran, M. Sodupe	
TITULO: Hydrogen Bonding and Proton Transfer in ionized DNA Base Pairs, Amino Acids and Peptides	
REF REVISTA/LIBRO: <i>Quantum Biochemistry</i> , (2010) Vol 1, 219 Edited by Cheriff Matta, WILEY-VCH	CLAVE: CL
129	
AUTORES: R. Rios-Font, J. Bertran, M. Sodupe, L. Rodriguez-Santiago	
TITULO: On the mechanism of the N-glycosidic bond hydrolysis of 2-deoxyguanosine: insights from first principles calculations	
REF REVISTA/LIBRO: <i>Theoret. Chem. Acc.</i> (2011), 128, 619-626 (Published as part of the special issue celebrating theoretical and computational chemistry in Spain)	CLAVE: A
130	
AUTORES: M. Sodupe, E. Sánchez-Marcos	
TITULO: Theoretical Chemistry in Spain	
REF REVISTA/LIBRO: <i>Theoret. Chem. Acc.</i> (2011), 128, 389-390 (Published as part of the special issue celebrating theoretical and computational chemistry in Spain)	CLAVE: A
131	
AUTORES: A. Rimola, P. Ugliengo, M. Sodupe	
TITULO: Computational simulations of prebiotic processes	
REF REVISTA/LIBRO: <i>Genesis: Origin of Life on Earth and Planets</i> , Springer (2011)	CLAVE: CL
132	
AUTORES: C. Rodríguez, A. Rimola J. Ali-Torres, M. Sodupe, P. González-Duarte	
TITULO: In silico strategies for the selection of chelating compounds with potential application in metal-promoted neurodegenerative diseases	
REF REVISTA/LIBRO: <i>J. Comp. Aid. Mol. Des.</i> (2011) 25:21-30	CLAVE: A

133

AUTORES: A. Rimola, P. Ugliengo, M. Sodupe

TITULO: Adsorción y polimerización de aminoácidos en superficies de minerales. Simulaciones computacionales de procesos prebióticos.

REF REVISTA/LIBRO: *Anales de Química* (2011), 2, 137-146

CLAVE: A

134

AUTORES: P. Ugliengo, A. Rimola, M. Sodupe

TITULO: In-silico study of the interstellar prebiotic formation and delivery of glycine

REF REVISTA/LIBRO: *Rendiconti Lincei* (2011), 22, 137-144

CLAVE: A

135

AUTORES: Jorge Alí-Torres, Luis Rodríguez-Santiago and Mariona Sodupe

TITULO: Computational calculations of pK_a values of imidazole in Cu(II) complexes of biological relevance

REF REVISTA/LIBRO: *PhysChemChemPhys* (2011), 13, 7852-7861

CLAVE: A

136

AUTORES: F. Nuñez-Zarur, X. Solans-Monfort, L. Rodríguez-Santiago, R. Pleixats, M. Sodupe

TITULO: Mechanistic insights into the ring closing enyne metathesis (RCEYM) process with the second generation Grubbs-Hoveyda catalyst. A DFT study

REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Eur. J.*, (2011) 17, 7506-7520

CLAVE: A

137

AUTORES: X. Solans-Monfort, J.L. G. Fierro, L. Hermosilla, C. Sieiro, M. Sodupe, R. Mas-Ballester

TITULO: O-O Bond activation in H_2O_2 and $(CH_3)_3C-OOH$ mediated by $[Ni(cyclam)(CH_3CN)_2](ClO_4)_2$: Different mechanisms to form the same Ni(III) product?

REF REVISTA/LIBRO: *Dalt. Trans.* (2011), 40, 6868-6876

CLAVE: A

138

AUTORES: A. Rimola, J. Alí-Torres, Cristina Rodríguez-Rodríguez, J. Poater, E. Matito, Miquel Sola, M. Sodupe

TITULO: Ab Initio Design of Chelating Ligands Relevant to Alzheimer's Disease: Influence of Metalloaromaticity

REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A* (2011) 115 (45), 12659–12666

CLAVE: A

139

AUTORES: J. Alí-Torres, L. Rodríguez-Santiago, J. D. Marechal, M. Sodupe

TITULO: Three Dimensional Models of Cu^{2+} - $A\beta(1-16)$ Complexes from Computational Approaches

REF REVISTA/LIBRO: *J. Am. Chem. Soc.* (2011), 133(38): p. 15008-15014.

CLAVE: A

140

AUTORES: F. Musso, P. Ugliengo, M. Sodupe

TITULO: Do H-Bond Features of Silica Surfaces Affect the H_2O and NH_3 Adsorption? Insights from Periodic B3LYP Calculations

REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem A.*, (2011) 115(41): p. 11221-11228.

CLAVE: A

141

AUTORES: J. Alí-Torres, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe, A. Rauk

TITULO: Structure and Stabilities of $Fe^{2+/3+}$ Complexes Relevant to Alzheimer's Disease: An ab initio Study.

REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. A* (2011) 115(45) 12523-12530.

CLAVE: A

142

AUTORES: B. Mueller, W.-Z. Shen, M.P.J. Sanz, F.M. Alberti, d.W.T. van, M. Noguera, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe, B. Lippert

TITULO: Pt(II) Coordination to N1 of 9-Methylguanine: Why it Facilitates Binding of Additional Metal Ions to the Purine Ring.

REF REVISTA/LIBRO: *Chem.--Eur. J.*, (2011). 17(36): p.9970-9983.

CLAVE: A

143

AUTORES: P. Mignon, M. Sodupe

TITULO: Theoretical study of the adsorption of DNA bases on the acidic external surface of montmorillonite.

REF REVISTA/LIBRO: *Phys.Chem.Chem.Phys.*(2012) 14, pp 945-954.

CLAVE: A

144

AUTORES: F. Núñez-Zarur, X. Solans-Monfort, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe

TITULO: Differences in the Activation Processes of Phosphine-Containing and Grubbs-Hoveyda-Type Alkene Metathesis Catalysts

REF REVISTA/LIBRO: *Organometallics* (2012) 31 (11), pp 4203–4215.

CLAVE: A

145

AUTORES: F. Musso, P. Mignon, P. Ugliengo, M. Sodupe

- TITULO: Cooperative effects at water–crystalline silica interfaces strengthen surface silanol hydrogen bonding. An *ab initio* molecular dynamics study
 REF REVISTA/LIBRO: *Phys.Chem.Chem.Phys.* (2012) 14, 10507-10514 CLAVE: A
- 146
 AUTORES: A. Rimola, M. Sodupe, P. Ugliengo
 TITULO: Computational Study of Interstellar Glycine Formation Occurring at Radical Surfaces of Water Ice Dust Particles
 REF REVISTA/LIBRO: *Astrophysical J.* (2012) 754:24 (10pp), 2012 CLAVE: A
- 147
 AUTORES: J. F. Lambert, M. Sodupe and P. Ugliengo Prebiotic (Ed.)
 TITULO: Prebiotic Chemistry
 REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Soc. Rev.*,(2012),41, 5373-5374. CLAVE: A
- 148
 AUTORES: F. Núñez-Zarur, J. Poater, L. Rodríguez-Santiago, X. Solans-Monfort, M. Solà, M. Sodupe
 TITULO: On the electronic structure of second generation Hoveyda-Grubbs alkene metathesis precursors
 REF REVISTA/LIBRO: *Comp. Theor. Chem.* (2012), 996, 57-67. CLAVE: A
- 149
 AUTORES: F. Núñez-Zarur, X. Solans-Monfort, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe
 TITULO: Exo/endo Selectivity of the Ring-Closing Enyne Methathesis Catalyzed by Second Generation Ru-Based Catalysts. Influence of Reactant Substituents
 REF REVISTA/LIBRO: *ACS Catalysis*, (2013), 3, 206-218 CLAVE: A
- 150
 AUTORES: A. Rimola, D. Costa, M. Sodupe, J.F. Lambert, P. Ugliengo
 TITULO: Silica Surface Features and Their Role in the Adsorption of Biomolecules: Computational Modeling and Experiments
 REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Rev.* (2013), 113, 4216-4313 CLAVE: A
- 151
 AUTORES: F. Nunez-Zarur, X. Solans-Monfort, L. Rodriguez-Santiago, R. Pleixats, M. Sodupe
 TITULO: DFT study on the recovery of Hoveyda-Grubbs-type catalyst precursors in enyne and diene ring closing metathesis
 REF REVISTA/LIBRO: *Chem. -Eur. J.* (2013), 19 (43), 14553-14565. CLAVE: A
- 152
 AUTORES: J. Ali-Torres, A. Rimola, C. Rodriguez-Rodriguez, L. Rodriguez-Santiago, M. Sodupe,
 TITULO: Insights on the Binding of Thioflavin Derivative Markers to Amyloid-Like Fibril Models from Quantum Chemical Calculations.
 REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. B* (2013), 117 (22), 6674-6680 CLAVE: A
- 153
 AUTORES: A. Rimola, M. Sodupe
 TITULO: Physisorption vs. chemisorption of probe molecules on boron nitride nanomaterials: the effect of surface curvature.
 REF REVISTA/LIBRO: *PhysChemChemPhys* (2013) 15(31), 13190-13198. CLAVE: A
- 154
 AUTORES: J. Navarro, A. Rimola, M. Sodupe
 TITULO: Surface reaction of acetylene with H-terminated silicon surfaces. A theoretical study from hybrid DFT-D2 periodic simulations
 REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. C* (2013) 117(29), 15130-15138 CLAVE: A
- 155
 AUTORES: Mignon, P.; Sodupe, M
 TITULO: Structural Behaviors of Cytosine into the Hydrated Interlayer of Na+-Montmorillonite Clay. An *ab Initio* Molecular Dynamics Study.
 REF REVISTA/LIBRO: *J. Phys. Chem. C* (2013) 117 (49), 26179-26189 CLAVE: A
- 156
 AUTORES: R. Sabate, L. Rodriguez-Santiago, M. Sodupe, S. J. Saupe, S. Ventura
 TITULO: Thioflavin-T excimer formation upon interaction with amyloid fibers.
 REF REVISTA/LIBRO: *Chem. Comm.* (2013) 49 (51), 5745-5747. CLAVE: A
- 157
 AUTORES: M.A. Telpoukhovskaia, C.Rodríguez-Rodríguez, J. F. Cawthray, L.E. Scott, B. D. G., Page, J. Alí-Torres, M. Sodupe, G. A. Bailey, B. O. Patricka, C.Orvig

TITULO: 3-Hydroxy-4-pyridinone derivatives as metal ion and amyloid binding agents

REF REVISTA/LIBRO: *Metallomics* (2014)

CLAVE: A

158

AUTORES: F.M. Albertí, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe, A. Mirats, H. Kaitsiotou, P.J. Sanz Miguel, B. Lippert

TITULO: Mixed Adenine/Guanine Quartets with Three trans- α 2PtII (α =NH3 or MeNH2) Cross-Links: Linkage and Rotational Isomerism, Base Pairing, and Loss of NH3

REF REVISTA/LIBRO: *Chem. -Eur. J.* (2014) DOI: 10.1002/chem.201304686

CLAVE: A

Estancias en Centros extranjeros
(estancias continuadas superiores a un mes)

CLAVE: D = doctorado, P = postdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras (especificar).

Centro: NASA Ames Research Center
Localidad: Moffett Field, CA País EEUU Fecha: 1990-1992 Duración (semanas): 104
Tema: Estudio teórico de la interacción metal-ligando
Clave: P

Centro:
Localidad: País Fecha: Duración (semanas):
Tema:
Clave:

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Contribuciones a Congresos (últimos 6 años)

Autores:

Título:

Tipo de participación:

Congreso:

Publicación:

Lugar celebración:

Fecha:

1

AUTORES: **M. Sodupe**, A. Oliva, J. M. Lluch , J. Bertran

TITULO: "Estudi teòric de la reacció de l'ió Fe⁺ amb la molècula d'hidrogen"

TIPO DE PARTICIPACION: **Comunicación oral**

CONGRESO: III Reunió de Química Quàntica de Catalunya

LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona

AÑO: Junio 1987

2

AUTORES: **M. Sodupe**, E. Wunsch, J.M. Lluch, A.Oliva, J. Bertran

TITULO: "Adición radicalària de haluros de hidrógeno a alquenos"

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

CONGRESO: XVII Congrès dels Químics teòrics d'Expressió Llatina

LUGAR DE CELEBRACION: Peñíscola

AÑO: Septiembre de 1987

3

AUTORES: **M. Sodupe**, E. Wunsch, J.M. Lluch, A.Oliva, J. Bertran

TITULO: "Regioselectivity in the radical addition of hydrogen halides to olefins"

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

CONGRESO: WATOC , World Congress of Theoretical Organic Chemists

LUGAR DE CELEBRACION: Hungria

AÑO: Agosto 1987

4

AUTORES: M. Sodupe

TITULO:

TIPO DE PARTICIPACION: Miembro del comité local organizador

CONGRESO: New Theoretical Concepts for Understanding Organic Reactions. NATO advanced study institute.

LUGAR DE CELEBRACION: Sant Feliu de Guixols (Girona)

AÑO: Julio 1988

5

AUTORES: M. Sodupe, A. Oliva, J. M. Lluch , **J. Bertran**

TITULO: "Estudio teórico de la estructura del complejo Cl₄W=CH₂".

TIPO DE PARTICIPACION: Poster

CONGRESO: XXII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química.

LUGAR DE CELEBRACION: Murcia

AÑO: Septiembre 1988

6

AUTORES: **M. Sodupe**, J. M. Lluch , F. Illas, J. Rubio

TITULO: "Estudi SCF i CI de les molècules FeH⁺ i FeH"

TIPO DE PARTICIPACION: **Comunicación oral**

CONGRESO: V Reunió de Química Quàntica de Catalunya

LUGAR DE CELEBRACION: Bellaterra

AÑO: Junio 1989

7

AUTORES: M. Sodupe, V. Branchadell, A. Oliva, R. M. Ortuño, D. Gomez-Pardo, A. Guignant i J. D'Angelo
TITULO: "Diles Alder Reactions of heterosubstituted dienes with pentacyclic dienophiles: an experimental and theoretical study"
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
CONGRESO: Journees de Chimie Organique, Societe Francaise de Chimie
LUGAR DE CELEBRACION: Palaiseau
AÑO: Septiembre 1989

8

AUTORES: M. Sodupe, J. M. Lluch, A. Oliva, J. Bertran
TITULO: "Estudio ab initio de la estructura del complejo $Cl_4W=CH_2$ ".
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
CONGRESO: II Congrés Nacional del GEFAM
LUGAR DE CELEBRACION: Palma de Mallorca
AÑO: Octubre 1989

9

AUTORES: **M. Sodupe**, J. M. Lluch, A. Oliva, J. Bertran
TITULO: "Estudi ab initio de la reacció entre els complexos $Cl_4W=CH_2$ ($M=W$ i Mo) i la molécula d'etilè"
TIPO DE PARTICIPACION: **Comunicación Oral**
CONGRESO: VI Reunió del Grup de Química Quàntica de Catalunya
LUGAR DE CELEBRACION: Valencia
AÑO: Junio 1990

10

AUTORES: M. Sodupe, J. M. Lluch, A. Oliva, J. Bertran
TITULO: "Structure and Reactivity of tungsten and Molybdenum carben complexes"
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
CONGRESO: WATOC, Second World Congress of Theoretical organic Chemists
LUGAR DE CELEBRACION: Toronto
AÑO: Julio 1990

11

AUTORES: M. Sodupe, V. Branchadell, R. M. Ortuño, A. Oliva, D. Gomez-Pardo, A. Guignant i J. D'Angelo
TITULO: "Reacciones de Diles Alder de dienos heterosubstituidos con dienofilos pentacíclicos: Estudio experimental y teórico"
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
CONGRESO: VI Journees Franco Espanyoles de CEIME Organique
LUGAR DE CELEBRACION: Rosas
AÑO: Mayo 1990

12

AUTORES: M. Sodupe and C.W. Bauschlicher
TITULO: "A determinatio of Al^+ - ligand binding energies"
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
CONGRESO: West Coast Theoretical Chemistry Conference
LUGAR DE CELEBRACION: Moffet Field, California
AÑO: 1991

13

AUTORES: M. Sodupe, C.W. Bauschlicher, H. Partridge, S. Langhoff
TITULO: "Study of ligand-ligand interactions in ML_n^+ systems"
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
CONGRESO: West Coast Theoretical Chemistry Conference
LUGAR DE CELEBRACION: Moffet Field, California
AÑO: 1991

14

AUTORES: M. Sodupe, C. W. Bauschlicher
TITULO: "A theoretical study of the bonding in transition metal ligand-cations"
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
CONGRESO: 11th Canadian Sumposium of Theoretical Chemistry
LUGAR DE CELEBRACION: Montreal
AÑO: Agosto 1992

15

AUTORES: **M. Sodupe** and Charles W. Bauschlicher
TITULO: "Estudi teòric dels cations mono i dipositius de $M H_2 O$ i MNH_3 ($M=Mg, Ca$ i Sr)"
TIPO DE PARTICIPACION: **Comunicación oral**
CONGRESO: X Reunió del Grup de Química Quàntica de Catalunya
LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona
AÑO: Julio 1994

16

AUTORES: **M. Sodupe**, A. Oliva, J. Bertran
TITULO: "A theoretical study of the ionizations of H_2O-H_2O , NH_3-H_2O and H_2O-FH hydrogen bonded molecules"
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
CONGRESO: 8th International Congress of Quantum Chemistry
LUGAR DE CELEBRACION: Praga
AÑO: Junio 1994

17

AUTORES: **Luis Rodríguez**, Vicenç Branchadell, Mariona Sodupe
TITULO: "Estudio teórico de la coordinación de NO_2 a los átomos de Cu y Ag "
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación oral
CONGRESO: XI Reunió del grup de Química Quàntica de Catalunya
LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona
AÑO: Junio 1995

18

AUTORES: Mariona Sodupe, Antonio Oliva, **Juan Bertran**
TITULO: "A theoretical study of the ionization of H_2S-H_2S , H_2S-PH_3 and H_2S-HCl hydrogen bonded molecules"
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
CONGRESO: International Conference in Memory of S. F. Boys and in Honour of Y. Shavitt. Molecular Quantum Mechanics
LUGAR DE CELEBRACION: Cambridge
AÑO: Septiembre 1995

19

AUTORES: V. Branchadell, L. Rodríguez, **M. Sodupe**
TITULO: "Coordination of NO_2 on Cu and Ag "
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
CONGRESO: International Conference in Memory of S. F. Boys and in Honour of Y. Shavitt. Molecular Quantum Mechanics
LUGAR DE CELEBRACION: Cambridge
AÑO: Septiembre 1995

20

AUTORES: Mariona Sodupe, V. Branchadell, **Luis Rodríguez-Santiago**
TITULO: "Comparison of density functional and CCSD(T) methods in the study of metal-ligand systems: $Sc-CO_2$ and $Cu-NO_2$ "
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
CONGRESO: 6th international conference on theoretical aspects of heterogeneous catalysis
LUGAR DE CELEBRACION: Tarragona
AÑO: Junio 1996

21

AUTORES: **Luis Rodríguez**, Mariona Sodupe, Vicenç Branchadell
TITULO: "Comparación entre métodos DFT y CCSD en el estudio de sistemas metal-ligando: $Sc-CO_2$ y $Cu-NO_2$ "
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación oral
CONGRESO: XIII Reunió del grup de Química Quàntica de Catalunya
LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona
AÑO: Abril 1996

22

AUTORES: **Luis Rodríguez**, Vicenç Branchadell, Mariona Sodupe, Joachim Sauer
TITULO: "Interacciones de iones Cu^+ con NO_2 en fase gas y en zeolitas ZSM5"
TIPO DE PARTICIPACION: Comunicación oral
CONGRESO: XIII Reunió del grup de Química Quàntica de Catalunya
LUGAR DE CELEBRACION: Barcelona
AÑO: Julio 1997

23

AUTORES: Mariona Sodupe, V. Branchadell, Luis Rodríguez-Santiago
TITULO: "Coordination of NO₂ in gas phase and in Cu-ZSM5"
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
CONGRESO: Workshop on computational Chemistry
LUGAR DE CELEBRACION: Madrid
AÑO: Junio 1998

24

AUTORES: J. Bertran, Luis Rodríguez-Santiago, A. Oliva, M. Sodupe
TITULO: "Single vs Double proton transfer reaction in Watson-Crick Base pair radical cations"
TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia
CONGRESO: Workshop on computational Chemistry
LUGAR DE CELEBRACION: Madrid
AÑO: Junio 1998

25

AUTORES: Joan Bertran, Antoni Oliva, Luis Rodríguez Santiago, Mariona Sodupe
TITULO: "Potential energy profiles of proton transfer processes in cationic clusters"
TIPO DE PARTICIPACION: Conferencia invitada
CONGRESO: 14th International Conference on Physical Organic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACION: Florianópolis (Brasil)
AÑO: Agosto 1998

26

AUTORES: Albert Bargalló, Joan Bertran, Mariona Sodupe
TITULO: "Proton and Copper cations affinities of glycine. A theoretical study"
TIPO DE PARTICIPACION: Poster
CONGRESO: 14th International Conference on Physical Organic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACION: Florianópolis (Brasil)
AÑO: Agosto 1998

27

AUTORES: L.Rodríguez-Santiago, M. Sodupe, A. Oliva, J. Bertran
TITULO: "Proton versus hydrogen atom transfer in ionized organic bifunctional compounds"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: International Symposium on Physical Organic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid
AÑO: Julio 1999

28

AUTORES: X. Solans Monfort, V. Branchadell, Mariona Sodupe
TITULO: "Estructura molecular de l'especie ZCu (NO) (NO₂). Un intermedi rellevant en la descomposició catalítica de NO_x mitjançant Cu-ZSM-5"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: XV Reunió del grup de Química Teòrica de Catalunya
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona
AÑO: Julio 1999

29

AUTORES: L.Rodríguez-Santiago, M. Sodupe, A. Oliva, J. Bertran
TITULO: "Inter and intramolecular proton transfer proceses in hydrogen bonded radical cations"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación oral
CONGRESO: XIII th conference- Workshop "Horizons in Hydrogen bond Research"
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Polonia
AÑO: Septiembre 1999

30

AUTORES: L.Rodríguez-Santiago, M. Sodupe, A. Oliva, J. Bertran
TITULO: "Proton or hydrogen transfer in intramolecular hydrogen bonded systems: Malonaldehyde and glycine"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster
CONGRESO: 5th World Congress of Theoretical Oriented Chemist
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Londres
AÑO: Agosto 1999

31

AUTORES: S. Simon, M. Sodupe, J. Bertran

TITULO: "Efecte de la correcció de la correcció de counterpoise en les superfícies d'energia potencial de omplexos amb ponts d'hidrogen"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicació oral

CONGRESO: XVI Reunió del grup de Química Teòrica de Catalunya

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona

AÑO: Julio 2000

32

AUTORES: **M. Sodupe**, L.Rodríguez-Santiago, A. Oliva, J. Bertran

TITULO: "Intramolecular proton or hydrogen transfer in neutral and ionized salicylic acid and related compounds"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación oral**

CONGRESO: International Radical Ion Conference

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Peñíscola

AÑO: Mayo 2000

33

AUTORES: M. Sodupe, L.Rodríguez-Santiago, A. Oliva, J. Bertran

TITULO: "Hydrogen atom or proton transfer in neutral and single positive ions of salicylic acid and related compounds"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

CONGRESO: 10th International Congress of Quantum Chemistry

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Menton

AÑO: Junio 2000

34

AUTORES: L.Rodríguez-Santiago, M. Sodupe, J. Tortajada

TITULO: "Gas phase reactivity of Ni⁺ with Glycine"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

CONGRESO: 15th International Mass Spectrometry Conference

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona

AÑO: Agosto 2000

35

AUTORES: **Mariona Sodupe**, Luis Rodríguez-Santiago, A. Oliva y Juan Bertran

TITULO: "Inter and intramolecular proton transfer processes in ionized hydrogen bonded systems"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia invitada**

CONGRESO: ESPA, Electronic Structure, Predictions and Applications

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Donostia

AÑO: Octubre 2000

36

AUTORES: **Mariona Sodupe**

TITULO: "Cationització i ionització de sistemes amb ponts d'hidrogen"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia invitada**

CONGRESO: XVII Reunió del grup de Química Teòrica de Catalunya

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Tarragona

AÑO: Julio 2001

37

AUTORES: X. Solans-Monfort, J. Bertran, M. Sodupe, V. Branchadell

TITULO: "Theoretical Study of the Catalytic effect of H⁺ exchanged Zeolites on the keto-enol like isomerization od acetaldehyde and formamide"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

CONGRESO: ESCR (Electronic Structure and Chemical Reactivity) International Symposium in honor of J. Bertran

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona

AÑO: Septiembre 2001

38

AUTORES: M. Noguera, M. Sodupe, L. Rodríguez-Santiago, J. Tortajada

TITULO: "Gas phase reactivity of Ni⁺ Urea"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

CONGRESO: ESCR (Electronic Structure and Chemical Reactivity) International Symposium in honor of J. Bertran

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona

AÑO: Septiembre 2001

39

AUTORES: A. Gil, M. Sodupe, J. Bertran

TITULO: "Homolytic vs heterolytic bond cleavage in neutral and ionized AH_n species of second and third rows"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

CONGRESO: ESCR (Electronic Structure and Chemical Reactivity) International Symposium in honor of J. Bertran

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona

AÑO: Septiembre 2001

40

AUTORES: X. Solans, V. Branchadell, M. Sodupe

TITULO: "On the NO decomposition by Cu-ZSM5 through the ZCu(NO₂)(NO) or Zcu(N₂O₃) intermediates"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

CONGRESO: 6th WATOC (World Congress of Theoretical Oriented Chemists)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lugano

AÑO: Agosto 2002

41

AUTORES: M. Sodupe, M. Noguera, J. Bertran

TITULO: "Intermolecular proton transfer processes in Guanine-Cytosine Watson-Crick base pairs"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

CONGRESO: 6th WATOC (World Congress of Theoretical Oriented Chemists)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lugano

AÑO: Agosto 2002

42

AUTORES: M. Sodupe

TITULO: Intermolecular interactions and supramolecular systems"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Chair

CONGRESO: 6th WATOC (World Congress of Theoretical Oriented Chemists)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Lugano

AÑO: Agosto 2002

43

AUTORES: S. Simon, M. Sodupe, J. Bertran

TITULO: "Isomerization versus fragmentation of glycine radical cation"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

CONGRESO: ESPA2002 (Electronic structure, principles and applications)

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Sevilla

AÑO: Septiembre 2002

44

AUTORES: A. Gil, J. Bertrán, M. Sodupe

TITULO: "Gas phase dissociation energies of saturated AH_n⁺ radical cations and AH_n neutrals (A=Li-F, Na-Cl). Dehydrogenation, deprotonation, and formation of AH_{n-2}⁺-H₂ complexes"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

CONGRESO: Modelling Chemical reactivity: From Gas phase to solution and enzymes

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Nancy

AÑO: Julio 2003

45

AUTORES: A. Rimola, M. Sodupe, J. Pons, J. Ros

TITULO: Searching the best thioether-pyrazole hemilabileligand in Pd(II) Complexes"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

CONGRESO: Computational Modelling of Catalysis

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Mulheim

AÑO: Julio 2003

46

AUTORES: E. Constantino, M. Sodupe, L. Rodríguez-Santiago

TITULO: "On the bonding in Co⁺/Co²⁺-Glycine. Influence of d orbital occupation"

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

CONGRESO: 29^{eme} Congrès International des Chimistes Theoriciens d'Expression Latine"
LUGAR DE CELEBRACIÓN:Marrakech
AÑO: Septiembre 2003

47

AUTORES: M. Noguera, M. Sodupe, J. Bertran
TITULO: "Cu²⁺ role on DNA damage through Guanine-Cytosine base pair modification. Electrostatic and Oxidative effects on proton transfer processes"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster
CONGRESO: 29^{eme} Congrès International des Chimistes Theoriciens d'Expression Latine"
LUGAR DE CELEBRACIÓN:Marrakech
AÑO: Septiembre 2003

48

AUTORES: X. Solans-Monfort, V. Branchadell, M. Sodupe, J. Sauer
TITULO: "Electron hole formation in HZSM5"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster
CONGRESO: "10th International Conference on the applications of density functional theory in chemistry and physics"
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Brussels
AÑO: Septiembre 2003

49

AUTORES: L. Rodríguez-Santiago, M. Noguera, M. Sodupe, J. Y. Salpin, J. Tortajada
TITULO: "Gas phase reactivity of Ni+-Urea. Mass Spectrometry and Theoretical studies"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Poster
CONGRESO: 16th international mass spectrometry conference
LUGAR DE CELEBRACIÓN:Edinburgh
AÑO: Septiembre 2003

50

AUTORES: E. Constantino, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe
TITULO: "Influencia de l'ocupació d en les interaccions dels cations Co⁺ i Co²⁺ amb la glicina"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicació Oral
CONGRESO: XX Reunió de la Xarxa de Química Teòrica
LUGAR DE CELEBRACIÓN:Barcelona
AÑO: Juliol 2004

51

AUTORES: **M. Sodupe**
TITULO: "Modelos ab initio en zeolitas"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia invitada**
CONGRESO: Métodos *ab initio* para Sistemas Periódicos, MASP 2004
LUGAR DE CELEBRACIÓN:Barcelona
AÑO: Juliol 2004

52

AUTORES: A. Gil, M. Sodupe, J. Bertran
TITULO: "Enllaços d'hidrogen no habituals en els radical cations [AH₃-H₃O]⁺ (A = C, Si, Ge, Sn, i Pb). Enllaç d'hidrogen a un electró, enllaç d'hidrogen protó hidrur, i formació de complexes [H₂A-OH₂]⁺-H₂
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster
CONGRESO: XX Reunió de la Xarxa de Química Teòrica
LUGAR DE CELEBRACIÓN:Barcelona
AÑO: Juliol 2004

53

AUTORES: Jordi Poater, Miquel Solà, Albert Rimola, L. Rodríguez Santiago, M. Sodupe
TITULO: "Ground and low lying electronic states of Cu²⁺-H₂O. A difficult case for density functional methods"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster
CONGRESO: ESPA (Electronic Structure : Principles and Applications
LUGAR DE CELEBRACIÓN:Valladolid
AÑO: Septiembre 2004

54

AUTORES: M. Sodupe, M. Noguera, J. Bertrán, L. Blancafort.
TITULO: "Intermolecular proton transfer processes in the triplet state of Guanine-Cytosine base pair."
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster
CONGRESO: 7th WATOC (World Congress of Theoretical Oriented Chemists)
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Cape Town (South Africa)
AÑO: Enero 2005

55

AUTORES: A. Gil, M. Sodupe, A. Bertan
TITULO: "Ionization effects on peptide bond: A DFT study for the simplest peptide N-glycylglycine"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster
CONGRESO: 11th international conference on the application of DFT
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Geneva
AÑO: 2005

56

AUTORES: A. Gil, M. Sodupe, J. Bertran
TITULO: Efectes de la ionizació en l'enllaç peptídic
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicació oral
CONGRESO: XXI Reunió de la Xarxa de Química Teórica
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona
AÑO: 2005

57

AUTORES: M. Noguera, L. Blancafort, J. Bertran, M. Sodupe
TITULO: "Intermolecular proton transfer processes in the p-p* triplet states of Watson-Crick GC and AT base pairs"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster
CONGRESO: Modelling Interactions in Biomolecules II
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Prague
AÑO: 2006

58

AUTORES: R. Rios, J. Bertran, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe
TITULO: "Hydrolysis of the N-glycosidic Bond in 2-deoxyguanosine"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster
CONGRESO: Electronic Structure, Principles and Applications
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santiago de Compostela
AÑO: 2006

59

AUTORES: R. Rios, J. Bertran, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe
TITULO: "Hidrolisi de l'enllaç N-glicosídic a la 2-deoxyguanosine"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicació oral
CONGRESO: XXII Reunió de la Zarxa de Química Teórica
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona
AÑO: 2006

60

AUTORES: M. Sodupe
TITULO: "Ionization effects on amino acids and peptides. Influence of intramolecular hydrogen bonds"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia invitada**
CONGRESO: VII Girona Seminar on the Nature of the Chemical Bond
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Girona
AÑO: 2006

61

AUTORES: M. Sodupe
TITULO: "Is the Peptide bond activated by metal cations?"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia invitada**
CONGRESO: 11th International Conference on theoretical aspects of catalysis
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Berlin
AÑO: 2006

62

AUTORES: M. Sodupe

TITULO: "Polymerization on the Rocks. Aluminosilicate surfaces as promoters for the peptide bond formation"
CONGRESO: Theoretical Biophysics symposium
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia invitada**
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Cetraro (Italia)
AÑO: 2007

63

AUTORES: A. Rimola, L. Rodríguez-Santiago, M. Sodupe
TITULO: "Formació de l'enllaç peptídico en presència de Cu²⁺. Una visió molecular mitjançant càlculs mecanoquàntics"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicació Oral
CONGRESO: XXIII reunió de la Xarxa de Química Teòrica
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Tarragona
ÀMBITO: Nacional
AÑO: 2007

64

AUTORES: **M. Sodupe**, A. Rimola, P. Ugliengo
TITULO: "Polimerization on the Rocks. Aluminosilicates as promoters of the peptide bond"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación Oral**
CONGRESO: 13th International Conference on Biological inorganic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN/AÑO: Viena, Julio 2007
ÀMBITO: Internacional
AÑO: 2007

65

AUTORES: M. Noguera, L. Rodríguez-Santiago, V. Branchadell, E. Constantino, R. Ríos, M. Sodupe
TITULO: "On the bonding of first row transition metal cations to Guanine and Nucleobases"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster
CONGRESO: 13th International Conference on Biological Inorganic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Viena
ÀMBITO: Internacional
AÑO: 2007

66

AUTORES: A. Rimola, L. Rodríguez-Santiago, P. Ugliengo, M. Sodupe
TITULO: "Peptide bond formation mediated by Cu²⁺ interactions. Insights from first principles calculations"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster
CONGRESO: 13th International Conference on Biological Inorganic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Viena
ÀMBITO: Internacional
AÑO: 2007

67

AUTORES: C. Rodríguez, A. Rimola, M. Sodupe, P. González-Duarte
TITULO: "The role of metal ions and metal ions chelators in Alzheimer's disease"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster (Primer Premio)
CONGRESO: 13th International Conference on Biological Inorganic Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Viena
ÀMBITO: Internacional
AÑO: 2007

68

AUTORES: A. Rimola, P. Ugliengo, M. Sodupe
TITULO: "Hydrogen Bond and Dispersion. The driving forces for the adsorption of amino acids on silica surfaces"
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster
CONGRESO: 12 International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Physics and Chemistry
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Amsterdam
ÀMBITO: Internacional
AÑO: 2007

69

AUTORES: A. Rimola, P. Ugliengo, **M. Sodupe**
TITULO: Interaction of Biomolecules with silica derived surfaces
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Comunicación oral**

CONGRESO: WATOC
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Sydney
ÁMBITO: Internacional
AÑO: 2008

70

AUTORES: **M. Sodupe**
TITULO: Interaction of biomolecules with silica derived materials. Adsorption of nucleobases on Na⁺-Montmorillonite
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**
CONGRESO: Theoretical Biophysics International Symposium
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Roscoff (Francia)
ÁMBITO: Internacional
AÑO: 2009

71

AUTORES: **M. Sodupe**
TITULO: Interaction of biomolecules with silica derived materials.
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia Invitada**
CONGRESO: Theoretical Chemistry: Modeling Reactivity from Gas Phase to Biomolecules and Solids.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona
ÁMBITO: Internacional
AÑO: 2009

72

AUTORES **M. Sodupe**
TITULO: Computational simulations of prebiotic processes
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia invitada**
CONGRESO: NIS Colloquim "First chemical steps towards the origin of life"
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Torino
ÁMBITO: Internacional
AÑO: 2010

73

AUTORES F. Nuñez-Zarur, R. Pleixats, L. Rodríguez-Santiago, X. Solans-Monfort, M. Sodupe
TITULO Mechanistic Insights for Ene-yne Methathesis with Grubbs-Hoveyda Catalyst via DFT Calculations
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación Oral
CONGRESO: "XXVI Reunió Anual de la Xarxa de Referència de Química Teòrica i Computacional"
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Bellaterra
ÁMBITO: Nacional
AÑO: 2010

74

AUTORES F. Nuñez-Zarur, R. Pleixats, L. Rodríguez-Santiago, X. Solans-Monfort, M. Sodupe
TITULO Mechanistic Insights for Ene-yne Methathesis with Grubbs-Hoveyda Catalyst via DFT Calculations
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster
CONGRESO: "ESPA 2010. Electronic Structure: Principles and Applications"
LUGAR DE CELEBRACIÓN:
ÁMBITO: Oviedo
AÑO: 2010

75

AUTORES **M. Sodupe**
TITULO: Three dimensional models of Cu₂+Ab(1-16) from computational approaches.
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia invitada**
CONGRESO: WATOC "World association of Theoretical Oriented Chemistry"
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Santiago de Compostela
ÁMBITO: Internacional
AÑO: 2011

76

AUTORES **M. Sodupe**
TITULO: Computational models of Cu²⁺ complexes relevant to the Alzheimer disease..
TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia invitada**
CONGRESO: Molecular interactions in Biomolecules V

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Kutna Hora (Czech Republic)

ÁMBITO: Internacional

AÑO: 2011

77

AUTORES **M. Sodupe**

TITULO: Computational simulations of metal-ligand systems relevant to the Alzheimer disease..

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia invitada**

CONGRESO: XXVIII Reunió de la Xarxa de Química teórica i Computacional

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Barcelona

ÁMBITO: Nacional

AÑO: 2012

78

AUTORES: **M. Sodupe**

TITULO: Redox properties of Cu²⁺-Ab(1-16) complexes

TIPO DE PARTICIPACIÓN: **Conferencia invitada**

CONGRESO: IX Seminarios de Estudios Avanzados sobre Diseño Molecular y Bioinformática, SEADIM 09,

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Varadero (Cuba)

ÁMBITO: Internacional

AÑO: 2013

Tesis Doctorales dirigidas últimos 6 años

3

Título: "Proton transfer in DNA base pairs. Potential mutagenic processes"

Doctorando: Marc Noguera Julian

Universidad: Autònoma de Barcelona

Facultad / Escuela: Ciencias

Fecha: 2006

Calificaci3n: Apto "Cum Laude"

4

Título: "Structure and Reactivity of Hydrogen Bonded radical cations: Application to Amino Acids and Peptides"

Doctorando: Adrià Gil Mestres

Universidad: Autònoma de Barcelona

Facultad / Escuela: Ciencias

Fecha: 2006

Calificaci3n: Apto "Cum Laude"

5

Título: "Activation of aminoacids and peptides by interactions of Cu⁺ and Cu²⁺ cations and aluminosilicates surfaces"

Doctorando: Albert Rimola Gibert

Universidad: Autònoma de Barcelona

Facultad / Escuela: Ciencias

Fecha: 2007

Calificaci3n: Apto "Cum Laude"

6

Título: Activaci3n dels aminoàcids glicina i lisina i dls seus homopèptids per cations de cobalt. Estudis teòrics i d'espectrometria de masses

Doctorando: Erika Constantino Aguilera

Universidad: Autònoma de Barcelona

Facultad / Escuela: Ciencias

Fecha: 2008

Calificaci3n: Apto "Cum Laude"

7

Título: Hidr3lisi de l'enllaç N-glicosidic a la 2'deoxiguanosina. Estudis computacionals.

Doctorando: Raquel Rios Font

Universidad: Autònoma de Barcelona

Facultad / Escuela: Ciencias

Fecha: 2008

Calificaci3n: Apto "Cum Laude"

8

Título: Estudio Te3rico de la Estructura Electr3nica y Molecular de Complejos de Cu^{1+/2+} y Fe^{2+/3+} Relevantes en la Enfermedad de Alzheimer

Doctorando: Jorge Al3 Torres

Universidad: Autònoma de Barcelona

Facultad / Escuela: Ciencias

Fecha: 2011

Calificaci3n: Apto "Cum Laude"

9

Título: Theoretical study of the surface properties of crystalline and amorphous silica polymorphs

Doctorando: Federico Musso

Universidad: Autònoma de Barcelona

Facultad / Escuela: Ciencias

Fecha: 2011

Calificaci3n: Apto "Cum Laude"

Participación en comités y representaciones internacionales

Título del Comité: Miembro del Editorial Board de la revista "Computational & Theoretical Chemistry"

Tema:

Fecha: 2011-2014

Título del Comité: Editora Invitada en la revista "Theoretical Chemistry Accounts"

Tema: Número Especial sobre "Theoretical and Computational Chemistry in Spain"

Fecha: 2011

Título del Comité: Miembro del panel de expertos en el Congreso "Innovations in Zeolites and Ordered porous Solids", FEZA 2011, Valencia

Tema: "Modelling and Theoretical Studies"

Fecha: 2011

Título del Comité: Editora Invitada en la revista "Chem. Soc. Rev."

Tema: Número Especial sobre "Prebiotic Chemistry"

Fecha: 2012

Título del Comité: Comité Científico

Tema: International Conference "Electronic Structure Principles and Applications"

Fecha: 2012, Barcelona

Título del Comité: Comité Científico

Tema: International Conference "Electronic Structure Principles and Applications"

Fecha: 2014, Badajoz

Experiencia en organización de actividades de I+D

Organización de congresos, seminarios, jornadas, etc., científicos-tecnológicos

Título: "NATO Advanced Study Institute on New Theoretical Concepts for Understanding Organic reactions

Tipo de actividad: Miembro del comité organizador

Àmbito: Internacional

Fecha: Junio 1988

Título: ESCR Electronic Structure and Chemical Reactivity, an International Symposium in honor of Prof. J. Bertran

Tipo de actividad: Miembro del Comité organizador del Congreso (Secretaria)

Àmbito: Internacional

Fecha: Septiembre 2001

Título: "II Summer School of the Reference Network in Theoretical and Computational Chemistry

Tipo de actividad: Responsable del modulo "Prebiotic Chemistry"

Àmbito: Internacional

Fecha: Junio 2008

Título: "XXVI Reunió de la Xarxa de Química Teórica

Tipo de actividad: Presidenta del comité organizador

Àmbito: Nacional

Fecha: Julio 2010

Título: "WATOC 2011 Satellite Meeting. Theoretical modelling of materials"

Tipo de actividad: Miembro del comité organizador

Àmbito: Internacional

Fecha: Julio 2011

Nota: Si necesita más casos, añádalos utilizando las funciones de copiar y pegar con el 2º caso.

Experiencia de gestión de I+D
Gestión de programas, planes y acciones de I+D

Título: Plan Nacional de Ciencias y Tecnología Químicas, Subprograma de Química Básica BQU, Miembro del equipo gestor

Tipo de actividad: Evaluación de proyectos
Fecha: 2008-2012

Título: Miembro del comité de acceso del Barcelona Supercomputing Center/Red Española de Supercomputación.

Tipo de actividad: Evaluación de proyectos
Fecha: 2008- 2012

Título: Miembro de la comisión de lectores y colaboradores del área de Ciencias de la "Agencia de Qualitat Universitaria" (AQU) de la Generalitat de Catalunya.

Tipo de actividad: Acreditación de Lectores y Colaboradores
Fecha: 2008- 2014

Título: Miembro del Consejo de Dirección de la "Xarxa de Referencia Química Teòrica i Computacional" (<http://www.xrqtc.cat/xrqtc/index.php>)

Tipo de actividad: Definición de las líneas de actuación de la Red
Fecha: 2008- 2012

Otros méritos o aclaraciones que se desee hacer constar

Premios

Premio extraordinario de Licenciatura (Curso 1984-1985), Universidad Autónoma de Barcelona, 28-10-1987
Premio Extraordinario de Doctorado (Curso 1989-1990), Universidad Autónoma de Barcelona, 5-2-1993
Premio "Distinción de la Generalitat de Cataluña para la promoción de la Investigación Universitaria" (Categoría Joven Investigador) 7-6-2001
Premio "ICREA Academia 2011"

Investigación

4 sexenios de investigación reconocidos

Trabajos de investigación dirigidos no pertenecientes a tesis doctorales defendidas o en curso

- "The role of metal cations and substituents in the intramolecular proton transfer reaction of glycine"
Doctorando: Sallaraia Pulkinnen, Tesis de licenciatura defendida en la Universidad de Joensuu, Finlandia, 1999
- "Transferencias protónicas intermoleculares en el par de bases Guanina-Citosina"
Doctorando: F. Pannetier, Trabajo de final de carrera defendido en l'Ecole Normale Supérieur de Cachan, 2002

Postdocs

- "Estudio del efecto del error de supersposición de base en la estructura de sistemas con puentes de hidrógeno"
Postdoctorando: Silvia Simon, 2000 (6 meses)
- "Coordination properties of the oxime analogue of glycine to Cu(II)"
Postdoctorando: I. Georgieva, 2003 (3 meses)
- "DNA/RNA adsorption on Na⁺ and H⁺ Montmorillonite."
Postdoctorando: Pierre Mignon, 2008-2009
- "Ligand and metal cation Amyloid interactions",
Postdoctorando: Jorge Alí Torres, 2013-2014

Seminarios invitados

- Título "Estudios teóricos de reacciones catalizadas por zeolitas". Instituto de Química Computacional, Universidad de Gerona, Mayo 2002
- Título "Effects of Ionization and cationization on intermolecular proton transfer reactions in DNA base pairs of DNA base pairs". Laboratoire de Chimie Physique, Université de Paris sud, Orsay, Junio 2002
- Título "Proton transfer processes in radical cations", Humboldt-Universität zu Berlin, Institut fuer chemie, Marzo 2003
- Título: " Modelos ab-initio en zeolitas", Universidad de Barcelona, Julio 2004
- Título: "Polymerization on the Rocks. Aluminosilicates as promoters of peptide bond formation", Universidad de Barcelona, Abril 2007
- Título: "Metal Ion Complexes relevant in the Alzheimer disease. Atomistic Insights from Computational Simulations, Universitat Jaume I, Abril 2013.

Gestión

- Directora de la Unidad de Química Física 1-1-2000/31-12-2001
- Miembro del equipo del departamento de Química desde 2004 hasta 2007. Responsable del área de investigación.
- Coordinadora adjunta para la implantación de los nuevos planes de estudio del Grado de Química, 2009-2010
- Coordinadora de la Universidad Autónoma de Barcelona del programa de doctorado interuniversitario "Química Teórica y Computacional" en la Curso 2003/2004, 2004/2005. Coordinadora Nacional del mismo programa el curso 2005/06

Otros

- Miembro de la comisión interna de evaluación de la Titulación de Químicas, Universidad Autónoma de Barcelona, 1999
- Miembro de la comisión de revisión de planes de estudios de la Titulación de Químicas, 2008
- Miembro de la Comisión de Grandes Usuarios de Supercomputación (GUCAP) del Centro de Supercomputación de Catalunya (CESCA)



María Mercedes Velázquez Salicio

Fecha del documento: 21/02/2014

v 1.3.0

4aee1682124d0695535e4528dd32b939

Este fichero electrónico (PDF) contiene incrustada la tecnología CVN (CVN-XML). La tecnología CVN de este fichero permite exportar e importar los datos curriculares desde y hacia cualquier base de datos compatible. Listado de Bases de Datos adaptadas disponible en <http://cvn.fecyt.es/>

**María Mercedes Velázquez Salicio**

Apellidos: **Velázquez Salicio**
 Nombre: **María Mercedes**
 DNI:
 Fecha de nacimiento:
 Sexo: **Mujer**
 Nacionalidad: **España**
 País de nacimiento: **España**
 Provincia de contacto:
 Dirección de contacto:
 Código postal:
 País de contacto: **España**
 Ciudad de contacto:
 Teléfono fijo:
 Fax:
 Correo electrónico: **mvsal@usal.es**

Situación profesional actual

Nombre de la entidad: Universidad de Salamanca
Departamento, servicio, etc.: Universidad de Salamanca, Universidad de Salamanca
Categoría/puesto o cargo: Catedrático de **Docente (Sí/No):** No
 Universidad
Fecha de inicio: 26/11/2011
Modalidad del contrato: Funcionario/a **Tipo de dedicación:** Tiempo completo
Primaria (Cód. Unesco): 221004 - Química de coloides
Secundaria (Cód. Unesco): 221016 - Química de interfaces
Terciaria (Cód. Unesco): 230700 - Química física
Dedicación profesional actual: Catedrático de Universidad
Palabras clave dedicación: Química física; Química física de materiales; Fotoquímica

Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Nombre de la entidad	Categoría/puesto o cargo	Fecha de inicio
1	Universidad de Salamanca	Profesora Titular	02/04/1998
2	Universidad de Salamanca	Profesora Titular	19/07/1991
3	Universidad de Salamanca	Profesora Titular Interina	23/11/1990
4	Universidad de Salamanca	Ayudante L.R.U.	01/10/1987
5	Universidad de Salamanca	Profesor Colaborador	01/12/1982
6	Universidad de Salamanca	Profesor Ayudante	01/10/1979
7	Universidad de Salamanca	Profesor Ayudante	01/10/1978



- 1** **Nombre de la entidad:** Universidad de Salamanca
Categoría/puesto o cargo: Profesora Titular **Es gestión docente:** No
Fecha de inicio: 02/04/1998, 13 años - 7 meses - 23 días
- 2** **Nombre de la entidad:** Universidad de Salamanca
Categoría/puesto o cargo: Profesora Titular **Es gestión docente:** No
Fecha de inicio: 19/07/1991, 6 años - 8 meses - 13 días
- 3** **Nombre de la entidad:** Universidad de Salamanca
Categoría/puesto o cargo: Profesora Titular **Es gestión docente:** No Interina
Fecha de inicio: 23/11/1990, 7 meses - 25 días
- 4** **Nombre de la entidad:** Universidad de Salamanca
Categoría/puesto o cargo: Ayudante L.R.U. **Es gestión docente:** No
Fecha de inicio: 01/10/1987, 3 años - 1 mes - 21 días
- 5** **Nombre de la entidad:** Universidad de Salamanca
Categoría/puesto o cargo: Profesor Colaborador **Es gestión docente:** No
Fecha de inicio: 01/12/1982, 4 años - 10 meses
- 6** **Nombre de la entidad:** Universidad de Salamanca
Categoría/puesto o cargo: Profesor Ayudante **Es gestión docente:** No
Fecha de inicio: 01/10/1979, 3 años - 2 meses
- 7** **Nombre de la entidad:** Universidad de Salamanca
Categoría/puesto o cargo: Profesor Ayudante **Es gestión docente:** No
Fecha de inicio: 01/10/1978, 1 año



Formación académica recibida

Titulación universitaria

Diplomaturas, licenciaturas e ingenierías, grados y másteres

Nombre del título: Licenciado en Ciencias Químicas
Entidad que expide el título: Universidad de Salamanca
Título homologado: No

Doctorados

Programa de doctorado: Doctor en Ciencias Químicas
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Fecha de la titulación: 28/11/1982
Doctorado Europeo: No
Título de la tesis: Estudio Cinético y mecanismos de catálisis micelar: reacción de hidrólisis ácida de éteres vinílicos en presencia de agregados micelares.
Director/a de tesis: Miguel Angel Herraez Zarza
Mención de calidad: No
Premio extraordinario doctor: No
Título homologado: No

Formación especializada, continuada, técnica, profesionalizada, de reciclaje y actualización (distinta a la formación académica reglada y a la sanitaria)

- Título de la formación:** Primer simposium nacional sobre diseño de experimentos, tratamiento de datos en cinética química, cinética enzimática y farmacocinética
Entidad que expide el título: Universidad de Salamanca
- Título de la formación:** Cromatografía Líquida de alta eficacia
Entidad que expide el título: Kontron S.A. , Madrid
- Título de la formación:** I Jornadas de Estadística
Entidad que expide el título: Instituto de Ciencias de la Educación, Universidad de Salamanca
- Título de la formación:** Symposium on Molecular forces and Molecular Dynamics
Ciudad: Coimbra, Portugal
Entidad que expide el título: Sociedade Portuguesa de Química
- Título de la formación:** Introducción a los ordenadores electrónicos
Entidad que expide el título: Instituto de Ciencias de la Educación, Universidad de Salamanca



- 6 Título de la formación:** Curso de Resonancia Magnética Nuclear
Entidad que expide el título: Sociedad Española de óptica

Cursos y seminarios recibidos de perfeccionamiento, innovación y mejora docente, nuevas tecnologías, etc., cuyo objetivo sea la mejora de la docencia

- 1 Título del curso/seminario:** Primer Ciclo para la obtención del Certificado de Aptitud Pedagógica
Entidad organizadora: Instituto de Ciencias de la Educación, Universidad de Salamanca
Fecha de inicio: 01/10/1977
Fecha de fin: 01/05/1978
- 2 Título del curso/seminario:** Segundo Ciclo para la obtención del Certificado de Aptitud Pedagógica
Entidad organizadora: Instituto de Ciencias de la Educación, Universidad de Salamanca,
Fecha de inicio: 01/10/1977
Fecha de fin: 01/05/1978
- 3 Título del curso/seminario:** El crédito ECTS: ¿Qué tenemos que hacer los profesores?.
Entidad organizadora: Cursos extraordinarios y formación continua de Universidad de Salamanca
Fecha de inicio: 01/01/2007
- 4 Título del curso/seminario:** Herramientas on-line aplicables en la adaptación al espacio europeo de educación superior en la Facultad de Ciencias Químicas
Entidad organizadora: Cursos extraordinarios y formación continua, Universidad de Salamanca
Fecha de inicio: 01/01/2007
- 5 Título del curso/seminario:** La formación postgraduada en el espacio europeo, latinoamericano y caribeño de educación superior
Entidad organizadora: Cursos extraordinarios y formación continua, Universidad de Salamanca
Fecha de inicio: 01/01/2005
- 6 Título del curso/seminario:** La Química Física en la reforma de las enseñanzas universitarias
Entidad organizadora: Universidad de Salamanca
Fecha de inicio: 01/01/1988
- 7 Título del curso/seminario:** Informática y Enseñanza
Entidad organizadora: Instituto de Ciencias de la Educación. Usal
Fecha de inicio: 01/01/1986
- 8 Título del curso/seminario:** Seminario de didáctica e Investigación en Físicoquímica Aplicada y Técnicas Instrumentales
Entidad organizadora: Instituto de Ciencias de la Educación, Universidad de Santiago de Compostela
Fecha de inicio: 01/01/1984
- 9 Título del curso/seminario:** I Seminario de didáctica e Investigación en Físicoquímica Aplicada y Técnicas Instrumentales
Entidad organizadora: Universidad de Salamanca
Fecha de inicio: 01/01/1982



Conocimiento de idiomas

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Francés	Bien	Bien	Bien
Inglés	Bien	Bien	Bien
Portugués	Bien	Bien	Bien

Actividad docente

Docencia impartida

- Nombre asignatura/curso:** Docencia Teórica en el curso de Comportamiento Fásico de Tensioactivos dentro del Programa de doctorado Interuniversitario Ciencia y Tecnología de Coloides e Interfases
Fecha inicio: 01/10/2008 **Fecha fin:** 01/09/2009
Tipo de horas/créditos: Horas
Entidad de realización: Universidad de Santiago de Compostela
- Nombre asignatura/curso:** Docencia Teórica en el curso de Comportamiento Fásico de Tensioactivos dentro del Programa de doctorado Interuniversitario Ciencia y Tecnología de Coloides e Interfases
Fecha inicio: 01/10/2007 **Fecha fin:** 01/09/2008
Tipo de horas/créditos: Horas
Entidad de realización: Universidad Pablo de Olavide, Sevilla
- Nombre asignatura/curso:** Docencia Teórica en el curso de Comportamiento Fásico de Tensioactivos dentro del Programa de doctorado Interuniversitario Ciencia y Tecnología de Coloides e Interfases
Fecha inicio: 01/10/2006 **Fecha fin:** 01/09/2007
Tipo de horas/créditos: Horas
Entidad de realización: Universidad de Vigo
- Nombre asignatura/curso:** Docencia Teórica en el curso de Comportamiento Fásico de Tensioactivos dentro del Programa de doctorado Interuniversitario Ciencia y Tecnología de Coloides e Interfases
Fecha inicio: 01/10/2005 **Fecha fin:** 01/09/2006
Tipo de horas/créditos: Horas
Entidad de realización: Universidad de Granada
- Nombre asignatura/curso:** Docencia Teórica en el curso de Comportamiento Fásico de Tensioactivos dentro del Programa de doctorado Interuniversitario Ciencia y Tecnología de Coloides e Interfases
Fecha inicio: 01/10/2004 **Fecha fin:** 01/09/2005
Tipo de horas/créditos: Horas
Entidad de realización: Universidad de Barcelona
- Nombre asignatura/curso:** Docencia Teórica en el curso de Comportamiento Fásico de Tensioactivos dentro del Programa de doctorado Interuniversitario Ciencia y Tecnología de Coloides e Interfases
Fecha inicio: 01/10/2003 **Fecha fin:** 01/09/2004
Tipo de horas/créditos: Horas
Entidad de realización: Universidad Complutense de Madrid



- 7** **Nombre asignatura/curso:** Docencia Teórica en el curso de Comportamiento Fásico de Tensioactivos dentro del Programa de doctorado Interuniversitario Ciencia y Tecnología de Coloides e Interfases
Fecha inicio: 01/10/2002 **Fecha fin:** 01/09/2003
Tipo de horas/créditos: Horas
Número de horas/créditos: 5
Entidad de realización: Universidad de Granada
- 8** **Nombre asignatura/curso:** Docencia teórica dentro del curso de carácter fundamental Química Coloidal en el programa de doctorado: Reactividad Química y Tecnología medioambiental
Fecha inicio: 01/10/1999 **Fecha fin:** 01/09/2000
Tipo de horas/créditos: Horas
Número de horas/créditos: 30
Entidad de realización: Universidad de Salamanca
- 9** **Nombre asignatura/curso:** Docencia Teórica en el curso de carácter fundamental Biofísica de membranas: caracterización espectroscópica dentro del programa de doctorado: Biofísicoquímica.
Fecha inicio: 01/10/1991 **Fecha fin:** 01/09/2000
Tipo de horas/créditos: Horas
Número de horas/créditos: 10
Entidad de realización: Universidad de Salamanca
- 10** **Nombre asignatura/curso:** V Reunión Sectorial de Química, celebrada en Salamanca, Mayo 2006. Conferencia y Mesa redonda sobre: El Posgrado en el Espacio Europeo de Enseñanza Superior.
Fecha inicio: 01/01/2006
Tipo de horas/créditos: Horas
Entidad de realización: Universidad de Salamanca
- 11** **Nombre asignatura/curso:** XIII Cursos de Verano de la Universidad de Alcalá de Henares dentro del Curso sobre coloides e interfases
Fecha inicio: 01/01/1996
Tipo de horas/créditos: Horas
Entidad de realización: Universidad de Alcalá de Henares

Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

- 1** **Título del trabajo:** Self-assembled systems of nanomaterials on LB films
Tipo de proyecto : Tesis Doctoral
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: Beatriz Martín García
Calificación: Apto Cum Laude
Fecha de lectura: 31/05/2013
Doctorado Europeo: Si
Mención de calidad: Si
- 2** **Título del trabajo:** Películas de Langmuir-Blodgett de Grafeno
Tipo de proyecto : Tesina
Codirector/a tesis: López-Díaz, D.
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: Rubén Sánchez Hidalgo
Calificación: Sobresaliente Cum Laude



Fecha de lectura: 30/01/2013

Doctorado Europeo: No

Mención de calidad: No

- 3 Título del trabajo:** Derivados de Grafeno en la preparación de Nanocomposites
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: Rubén Sánchez Hidalgo
Calificación: Sobresaliente
Fecha de lectura: 27/06/2012
Doctorado Europeo: No
Mención de calidad: No
- 4 Título del trabajo:** Caracterización y Propiedades de Monocapas de Langmuir de Tensioactivos Geminales
Tipo de proyecto : Tesina
Codirector/a tesis: Merchán, M. D.
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: Teresa Alejo
Calificación: Sobresaliente "CumLaude"
Fecha de lectura: 21/01/2010
Doctorado Europeo: No
Mención de calidad: No
- 5 Título del trabajo:** Propiedades y estructura de monocapas de tensioactivos y polímeros
Tipo de proyecto : Tesis Doctoral
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: David López-Díaz
Fecha de lectura: 07/2007
Doctorado Europeo: No
Mención de calidad: Si
- 6 Título del trabajo:** Propiedades Superficiales de tensioactivos zwitteriónicos
Tipo de proyecto : Tesis Doctoral
Codirector/a tesis: Maria Dolores Merchán
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: Cristina Delgado
Fecha de lectura: 12/2006
Doctorado Europeo: No
Mención de calidad: Si
- 7 Título del trabajo:** Efecto de la Adición de Polímeros solubles en agua sobre la estructura de Microemulsiones de Aerosol OT disuelto en Isooctano y tolueno
Tipo de proyecto : Tesis Doctoral
Codirector/a tesis: Licesio J. Rodríguez
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: González, M. D. C.
Fecha de lectura: 02/1998
Doctorado Europeo: No
Mención de calidad: No



- 8** **Título del trabajo:** Estudio termodinámico y estructural de la interacción de antiinflamatorios no esteroídicos con ciclodextrinas
Tipo de proyecto : Tesis Doctoral
Codirector/a tesis: Licesio J. Rodríguez
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: Valero, M.
Fecha de lectura: 06/1994
Doctorado Europeo: No
Mención de calidad: No
- 9** **Título del trabajo:** Aplicación de modelos estadísticos a la interpretación del proceso de agregación micelar de tensioactivos
Tipo de proyecto : Tesina
Codirector/a tesis: Licesio J. Rodríguez
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: J. Gil Negrete
Fecha de lectura: 09/1992
Doctorado Europeo: No
Mención de calidad: No
- 10** **Título del trabajo:** Distribución de alcoholes en disoluciones micelares de dodecil sulfato sódico
Tipo de proyecto : Tesina
Codirector/a tesis: Licesio J. Rodríguez
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: N. Fernández Monzón
Fecha de lectura: 09/1992
Doctorado Europeo: No
Mención de calidad: No
- 11** **Título del trabajo:** Estudio de la interacción de dibenzepina con ciclodextrinas y sistemas micelares aniónicos
Tipo de proyecto : Tesina
Codirector/a tesis: Licesio J. Rodríguez
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: González, M. D. C.
Fecha de lectura: 06/1991
Doctorado Europeo: No
Mención de calidad: No
- 12** **Título del trabajo:** Estudio cinético de la inhibición micelar de la hidrólisis ácida de Bromazepam
Tipo de proyecto : Tesina
Codirector/a tesis: Licesio J. Rodríguez
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: J. Novillo Fertrell
Fecha de lectura: 06/1988
Doctorado Europeo: No
Mención de calidad: No
- 13** **Título del trabajo:** Estudio cinético de la reacción de hidrólisis ácida de 1,4 benzodiazepinas en presencia de agregados micelares
Tipo de proyecto : Tesis Doctoral
Universidad que titula: Universidad de Salamanca



Doctorando-a/alumno-a: M.E. Moro
Fecha de lectura: 07/1987
Doctorado Europeo: No
Mención de calidad: No

- 14** **Título del trabajo:** Formación de micelas y catálisis micelar en sistemas binarios de tensioactivos
Tipo de proyecto : Tesis Doctoral
Codirector/a tesis: Licesio J. Rodríguez
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: García, M. I.
Fecha de lectura: 07/1987
Doctorado Europeo: No
Mención de calidad: No
- 15** **Título del trabajo:** Deconvolución y estudio comparativo de los espectros UV de antidepressivos tricíclicos en disolución acuosa
Tipo de proyecto : Tesina
Codirector/a tesis: Licesio J. Rodríguez
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: A.C. Mínguez Cabeza
Fecha de lectura: 06/1986
Doctorado Europeo: No
Mención de calidad: No
- 16** **Título del trabajo:** Estudio cinético de la reacción de hidrólisis ácida de Nitrazepam en presencia de sistemas micelares
Tipo de proyecto : Tesina
Codirector/a tesis: Licesio J. Rodríguez
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: M.P. Guijarro Pastor
Fecha de lectura: 06/1986
Doctorado Europeo: No
Mención de calidad: No
- 17** **Título del trabajo:** Espectrofotometría UV y deconvolución de bandas de diazepam, prazepam y flurazepam en disolución acuosa
Tipo de proyecto : Tesina
Codirector/a tesis: Licesio J. Rodríguez
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: M.P. González Hierro
Fecha de lectura: 06/1985
Doctorado Europeo: No
Mención de calidad: No
- 18** **Título del trabajo:** Estudio termodinámico de la interacción de imipramina, clomipramina y trimipramina con cicloheptaamilosa en disolución acuosa
Tipo de proyecto : Tesina
Codirector/a tesis: Licesio J. Rodríguez
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: C. Barbero Ramajo
Fecha de lectura: 06/1985



Doctorado Europeo: No
Mención de calidad: No

- 19 Título del trabajo:** Solubilización de diazepam y prazepam en sistemas micelares no iónicos
Tipo de proyecto : Tesina
Codirector/a tesis: Licesio J. Rodríguez
Universidad que titula: Universidad de Salamanca
Doctorando-a/alumno-a: M.E. Moro Vicente
Fecha de lectura: 06/1983
Doctorado Europeo: No
Mención de calidad: No

Participación en proyectos de innovación docente

Título del proyecto: Montaje de un espectrómetro de microrondas con modulación Stark para Experimentación en Química Física". Subvencionado por la Junta de Castilla y León, dentro del programa de "Ayudas para la elaboración de recursos de apoyo y experiencias innovadoras en la enseñanza universitaria"
Ciudad: España
Investigador/a principal: Jose Maria Alvariño
Número de participantes: 3
Tipo de convocatoria: Competitivo
Fecha de inicio: 01/01/2003
Fecha fin de la participación: 31/12/2004

Otras actividades/méritos no incluidos en la relación anterior

- 1 Descripción de la actividad:** Directora del Máster en Química de la Universidad de Salamanca
Fecha de fin de la actividad: 01/09/2013
- 2 Descripción de la actividad:** Coordinadora en la Universidad de Salamanca del Programa de doctorado Interuniversitario: Ciencia y Tecnología de Coloides e Interfases desde el bienio 2001-2003 hasta la actualidad. Este Programa de doctorado ha recibido Mención de Calidad en el bienio 2003-2005
Fecha de fin de la actividad: 31/12/2009
- 3 Descripción de la actividad:** Formó parte del Tribunal de Suficiencia Investigadora del Programa de Doctorado Química Teórica y Computacional
Fecha de fin de la actividad: 31/12/2008
- 4 Descripción de la actividad:** Formó parte del Tribunal de Suficiencia Investigadora del Programa de Doctorado Alimentación y medio ambiente: aspectos sanitarios y analíticos
Fecha de fin de la actividad: 31/12/2004
- 5 Descripción de la actividad:** Formó parte del Tribunal de Suficiencia Investigadora del Programa de Doctorado Química Teórica y Computacional
Fecha de fin de la actividad: 31/12/2004
- 6 Descripción de la actividad:** Formó parte del Tribunal de Suficiencia Investigadora del Programa de Doctorado: Ciencia y tecnología de Coloides e Interfases
Fecha de fin de la actividad: 31/12/2003



- 7 Descripción de la actividad:** Directora del Programa de doctorado Interuniversitario: Ciencia y Tecnología de Coloides e Interfases
Fecha de fin de la actividad: 31/12/2002

Experiencia científica y tecnológica

Actividad científica o tecnológica

Participación en proyectos de I+D+i financiados en convocatorias competitivas de Administraciones o entidades públicas y privadas

- 1 Denominación del proyecto:** Productos obtenidos por tecnologías de depósito y laminado de nanomateriales basados en carbono y plata para elementos funcionales de automoción (DINNAMIC)
Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional **Ámbito del proyecto:** Nacional
Entidad de realización: MINISTERIO DE ECONOMIA Y COMPETITIVIDAD
Investigador/es responsable/es: Cesar Merino
Número de investigadores/as: 4
Entidad/es financiadora/s: Ministerio de economía y competitividad
Cód. según financiadora: IPT-2012-0429-420000
Fecha de inicio: 01/10/2012, 2 años
Fecha fin: 01/10/2014
Cuantía total: 1.375.990,2
Dedicación: Tiempo completo
- 2 Denominación del proyecto:** Modulación de las propiedades de sistemas nanoestructurados, puntos cuánticos y grafeno, mediante la utilización de sistemas autoensamblados de polímeros y tensioactivos
Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional **Ámbito del proyecto:** Nacional
Entidad de realización: Ministerio de Ciencia e Innovación
Investigador/es responsable/es: Velázquez, M.
Número de investigadores/as: 4
Cód. según financiadora: MAT2010-19727
Fecha de inicio: 01/01/2011, 3 años
Fecha fin: 31/12/2013
Dedicación: Tiempo completo
- 3 Denominación del proyecto:** Sala blanca de nanotecnología de la Universidad de Salamanca (INNPLANTA 2010)
Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional **Ámbito del proyecto:** Nacional
Entidad de realización: Universidad de Salamanca
Investigador/es responsable/es: Diez, E.
Número de investigadores/as: 11
Entidad/es financiadora/s: MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACIÓN



Cód. según financiadora: PCT-420000-2010-008

Fecha de inicio: 01/01/2010, 3 años - 6 meses

Fecha fin: 30/06/2013

Cuantía total: 670.000

Dedicación: Tiempo completo

- 4 Denominación del proyecto:** Formación y propiedades de películas densas de polímeros adsorbidos en la interfase aire-agua: posibilidad de utilizarlas para la fabricación de sensores ópticos

Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional

Ámbito del proyecto: Autonómica

Entidad de realización: Universidad de Salamanca

Investigador/es responsable/es: Velázquez, M.

Número de investigadores/as: 5

Entidad/es financiadora/s:

Junta de Castilla y León

Cód. según financiadora: SA138A08

Fecha de inicio: 01/01/2008, 3 años

Fecha fin: 31/12/2010

Cuantía total: 11.800

Dedicación: Tiempo completo

- 5 Denominación del proyecto:** Interfases fluidas: propiedades de equilibrio y dinámicas de interfases con polímeros y tensioactivos

Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional

Ámbito del proyecto: Nacional

Entidad de realización: MINISTERIO DE EDUCACIÓN Y CIENCIA (MEC)

Investigador/es responsable/es: Velázquez, M.

Número de investigadores/as: 5

Cód. según financiadora: MAT2007-62666

Fecha de inicio: 01/12/2007, 3 años

Fecha fin: 30/11/2010

Dedicación: Tiempo completo

- 6 Denominación del proyecto:** Caracterización y comportamiento reológico de agregados formados por tensioactivos y polímeros en disolución acuosa

Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional

Ámbito del proyecto: Autonómica

Entidad de realización: Universidad de Salamanca

Investigador/es responsable/es: Velázquez, M.

Número de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

Junta de Castilla y León

Cód. según financiadora: SA03805

Fecha de inicio: 01/01/2005, 3 años

Fecha fin: 31/12/2007

Cuantía total: 13.100

Dedicación: Tiempo completo



- 7 Denominación del proyecto:** Estructura y propiedades de interfases que contienen tensioactivos y polímeros
Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional **Ámbito del proyecto:** Nacional
Entidad de realización: Universidad de Salamanca
Investigador/es responsable/es: Velázquez, M.
Número de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s: Ministerio de Educación y Ciencia
Cód. según financiadora: MAT2004-04180
Fecha de inicio: 2005, 3 años
Fecha fin: 2007
Cuantía total: 64.400
Dedicación: Tiempo completo
- 8 Denominación del proyecto:** Convocatoria de infraestructura Científico Tecnológica: espectrómetro de correlación fotónica (E.C.F.)
Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional **Ámbito del proyecto:** Nacional
Entidad de realización: Universidad Complutense de Madrid
Investigador/es responsable/es: Francisco Ortega
Número de investigadores/as: 2
Entidad/es financiadora/s: Ministerio de Ciencia y Tecnología
Cód. según financiadora: UCMA05-33-043
Fecha de inicio: 01/01/2005, 1 año
Fecha fin: 31/12/2005
Cuantía total: 105.000
Dedicación: Tiempo completo
- 9 Denominación del proyecto:** Estudio dinámico de la adsorción de tensioactivos en la interfase aire/agua: efecto de la estructura del tensioactivo y de la adición de polímeros
Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional **Ámbito del proyecto:** Nacional
Entidad de realización: Universidad de Salamanca
Investigador/es responsable/es: Velázquez, M.
Número de investigadores/as: 5
Entidad/es financiadora/s: Ministerio de Ciencia y Tecnología
Cód. según financiadora: BQU-2001-1507
Fecha de inicio: 2002, 3 años
Fecha fin: 2004
Cuantía total: 40.433,07
Dedicación: Tiempo completo
- 10 Denominación del proyecto:** Convocatoria de Infraestructura Científico tecnológica: Microscopio de elipsometría/epifluorescencia
Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional **Ámbito del proyecto:** Nacional
Entidad de realización: Universidad Complutense de Madrid



Investigador/es responsable/es: Francisco Ortega

Número de investigadores/as: 2

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Ciencia y Tecnología

Cód. según financiadora: UCMA-E031

Fecha de inicio: 01/01/2003, 1 año

Fecha fin: 31/12/2003

Cuantía total: 116.580

Dedicación: Tiempo completo

11 Denominación del proyecto: Estudio de las propiedades interfaciales y termodinámicas de agregados micelares puros y en presencia de polímeros

Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional

Ámbito del proyecto: Autonómica

Entidad de realización: Universidad de Salamanca

Investigador/es responsable/es: Velázquez, M.

Número de investigadores/as: 2

Entidad/es financiadora/s:

JUNTA DE CASTILLA LEON

Cód. según financiadora: SA 04/99

Fecha de inicio: 1999, 3 años

Fecha fin: 2001

Cuantía total: 2.823.900

Dedicación: Tiempo completo

12 Denominación del proyecto: Ayudas y subvenciones complementarias para la adquisición de una balanza de Langmuir

Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional

Ámbito del proyecto: Otros

Entidad de realización: Universidad de Salamanca

Investigador/es responsable/es: Velázquez, M.

Número de investigadores/as: 2

Entidad/es financiadora/s:

Universidad de Salamanca

Fecha de inicio: 1999, 1 año

Fecha fin: 1999

Cuantía total: 6.675,02

Dedicación: Tiempo completo

13 Denominación del proyecto: Estudio del efecto que produce la adición de polímeros en la estructura y estabilidad de microemulsiones w/o y o/w

Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional

Ámbito del proyecto: Internacional no UE

Entidad de realización: Universidad de Salamanca

Investigador/es responsable/es: Velázquez, M.

Número de investigadores/as: 2

Entidad/es financiadora/s:

ACCIÓN INTEGRADA HISPANO-PORTUGUESA

Fecha de inicio: 1997, 1 año

Fecha fin: 1997



Cuantía total: 2.584,35

Dedicación: Tiempo completo

14 Denominación del proyecto: Estudio del efecto que produce la adición de polímeros en la estructura y estabilidad de microemulsiones w/o y o/w

Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional

Ámbito del proyecto: Autonómica

Entidad de realización: Universidad de Salamanca

Investigador/es responsable/es: Velázquez, M.

Número de investigadores/as: 3

Entidad/es financiadora/s:

JUNTA DE CASTILLA LEON

Fecha de inicio: 1995, 3 años

Fecha fin: 1997

Cuantía total: 23.379,37

Dedicación: Tiempo completo

15 Denominación del proyecto: Ayudas y subvenciones complementarias para la adquisición de un tensiómetro de gota

Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional

Ámbito del proyecto: Otros

Entidad de realización: Universidad de Salamanca

Investigador/es responsable/es: Velázquez, M.

Número de investigadores/as: 2

Entidad/es financiadora/s:

Universidad de Salamanca

Fecha de inicio: 1996, 1 año

Fecha fin: 1996

Cuantía total: 13.435,76

Dedicación: Tiempo completo

16 Denominación del proyecto: Estudio estructural de micelas invertidas y microemulsiones formadas por mezclas polímero-tensioactivo en medios no acuosos

Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional

Ámbito del proyecto: Autonómica

Entidad de realización: Universidad de Salamanca

Investigador/es responsable/es: Velázquez, M.

Número de investigadores/as: 2

Entidad/es financiadora/s:

JUNTA DE CASTILLA LEON

Fecha de inicio: 1993, 2 años

Fecha fin: 1994

Cuantía total: 3.485,87

Dedicación: Tiempo completo

17 Denominación del proyecto: Estructura de los agregados micelares formados por mezclas polímero-tensioactivo en medios no acuosos. Posibilidad de utilizarse en separaciones selectivas.

Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional

Ámbito del proyecto: Internacional no UE

Entidad de realización: Universidad de Salamanca



Investigador/es responsable/es: Velázquez, M.

Número de investigadores/as: 1

Entidad/es financiadora/s:

DGICYT (DIRECCION GENERAL DE INVESTIGACION CIENTIFICA Y TÉCNICA)

Fecha de inicio: 1993, 1 año

Fecha fin: 1993

Cuantía total: 2.483,92

Dedicación: Tiempo completo

Participación en contratos, convenios o proyectos de I+D+i no competitivos con Administraciones o entidades públicas o privadas

Denominación del proyecto: Investigación sobre la obtención de nanoplaquetas de óxido de grafeno a partir de nanofibras de carbono y la purificación, reducción y deposición controlada de las mismas.

Modalidad del proyecto: De investigación y desarrollo incluida traslacional

Ámbito del proyecto: Autonómica

Calidad en que ha participado: Investigador/a

Entidad de realización: Universidad de Salamanca

Investigador/a responsable: Velázquez, M.

N.º investigadores/as: 2

Entidad/es financiadora/s:

Grupo Antolín Ingeniería S.A.

Fecha inicio: 26/05/2011, 2 años

Cuantía total: 100.000

Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1** Velázquez, M.; Beatriz Martín García. Nanoparticle self-assembly assisted by polymers: the role of shear stress in the nanoparticle arrangement of Langmuir and Langmuir-Blodgett Films. Langmuir. (Estados Unidos de América): 31/12/2013. ISSN 0743-7463

Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista

Posición sobre total: 1
- 2** López-Díaz, D.; Velázquez, M.; Santiago Blanco de la Torre; Ana Pérez Pisonero; Trujillano, R.; José Lúis García Fierro; Sergi Claramunt; Albert Cirera. The Role of Oxidative Debris on Graphene Oxide Films. ChemPhysChem-a European journal of chemical physics and physical chemistry. 14/17, pp. 4002 - 4009. (Alemania): 24/10/2013. ISSN 1439-4235

Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista

Posición sobre total: 2
- 3** Beatriz Martín García; Pedro M.R. Paulo; Silvia M.B. Costa; Velázquez, M. Photoluminescence Dynamics of CdSe QD/polymer Langmuir-Blodgett Thin Films: Morphology Effects. Journal of Physical Chemistry C. 117/28, pp. 14787 - 14795. 14/06/2013. ISSN 1932-7447

Tipo de producción: Artículo
Posición sobre total: 4

Tipo de soporte: Revista

- 4** Beatriz Martín García; Velázquez, M. Block Copolymer Assisted Self-Assembly of Nanoparticles into Langmuir-Blodgett Films: Effect of Polymer Concentration. *Materials chemistry and physics*. 141/1, pp. 324 - 332. (Suiza): 11/06/2013. ISSN 0254-0584

Tipo de producción: Artículo
Posición sobre total: 2

Tipo de soporte: Revista

- 5** Teresa Alejo; Beatriz Martín García; Merchán, M. D.; Velázquez, M. QDs-supported on Langmuir-Blodgett films of polymers and Gemini surfactant. *Journal of Nanomaterials*. 2013. ISSN 1687-4110

Tipo de producción: Artículo
Posición sobre total: 4

Tipo de soporte: Revista

- 6** Teresa Alejo; Merchán, M. D.; Velázquez, M. Polymer/Surfactant Assisted Self-assembly of Nanoparticles into Langmuir-Blodgett films. *Materials chemistry and physics*. 138, pp. 286 - 294. (Suiza): 18/11/2012. ISSN 0254-0584

Tipo de producción: Artículo
Posición sobre total: 3

Tipo de soporte: Revista

- 7** Beatriz Martín García; Velázquez, M.; Francesco Rossella; Vittorio Bellani; Diez, E.; Jose Luis Garcia Fierro; José Antonio Pérez Hernández; Juan Hernández Toro; Sergi Claramunt; Albert Cirera. Functionalization of reduced graphite oxide sheets with a zwitterionic surfactant. *ChemPhysChem-a European journal of chemical physics and physical chemistry*. 13/16, pp. 3682 - 3690. (Alemania): 12/11/2012. ISSN 1439-4235

Tipo de producción: Artículo
Posición sobre total: 2

Tipo de soporte: Revista

- 8** Sofia Heisig; Merchán, M. D.; Velázquez, M. Interaction Between PEI and CHAPS: Effect on the Association Processes in Bulk and on the Deposition onto Solid Wafers. *Journal of Colloid Science and Biotechnology*. 1/1, pp. 33 - 41. 01/06/2012. ISSN 2164-9634

Tipo de producción: Artículo
Posición sobre total: 3

Tipo de soporte: Revista

- 9** Velázquez, M.; Valero, M.; Francisco Ortega. Spontaneous vesicles modulated by polymers. *Polymers*. 3, pp. 1255 - 1267. 08/08/2011. ISSN 2073-4360

Tipo de producción: Artículo
Posición sobre total: 1

Tipo de soporte: Revista

- 10** Teresa Alejo; Merchán, M. D.; Velázquez, M. Specific ion Effects on the Properties of Cationic Gemini Surfactant Monolayers. *Thin solid films*. 519/16, pp. 5689 - 5695. (Holanda): 22/03/2011. ISSN 0040-6090

Tipo de producción: Artículo
Posición sobre total: 3

Tipo de soporte: Revista

- 11** Beatriz Martín García; Velázquez, M.; José Antonio Pérez Hernández; Juan Hernández Toro. Langmuir and Langmuir-Blodgett Films of a Maleic Anhydride Derivative: Effect of Subphase Divalent Cations. *Langmuir*. 26/18, pp. 14556 - 14562. (Estados Unidos de América): 26/08/2010. ISSN 0743-7463

Tipo de producción: Artículo
Posición sobre total: 2

Tipo de soporte: Revista

- 12** López-Díaz, D.; Velázquez, M. Evidence of glass transition in thin films of maleic anhydride derivatives: effect of the surfactant coadsorption. *Eur phys j e*. 26, pp. 417 - 425. 07/07/2008. ISSN 1292-8941

Tipo de producción: Artículo

Tipo de soporte: Revista

**Posición sobre total: 2**

- 13** Merchán, M. D.; Velázquez, M.; Delgado, C. Effect of the addition of polyelectrolytes on monolayers of carboxibetaines. *Journal of physical chemistry b.* 112, pp. 687 - 693. (Estados Unidos de América): 2008. ISSN 1089-5647

Tipo de producción: Artículo**Tipo de soporte:** Revista**Posición sobre total:** 2

- 14** López-Díaz, D.; Velázquez, M. Variation of the critical micelle concentration with surfactant structure: a simple method to analyze the role of the attractive-repulsive forces on the micellar association. *The Chemical Educator.* 12, pp. 327 - 330. 2007.

Tipo de producción: Artículo**Tipo de soporte:** Revista**Posición sobre total:** 2

- 15** Velázquez, M.; Margarita Valero; Francisco Ortega; José Benito Rodríguez González. Structure and size of spontaneously formed aggregates in Aerosol OT/PEG mixtures: effects of polymer size and composition. *Journal of colloid and interface science.* 316, pp. 762 - 770. (Estados Unidos de América): 2007. ISSN 0021-9797

Tipo de producción: Artículo**Tipo de soporte:** Revista**Posición sobre total:** 1

- 16** Velázquez, M. Current topics in Colloid & Interface Science Vol 7. Role of the entropic contributions on the synergistic effect in mixed micelles. pp. 41 - 46. 2007.

Tipo de producción: Capítulos de libros**Tipo de soporte:** Libro**Posición sobre total:** 1

- 17** López-Díaz, D.; García, M. I.; Velázquez, M. Surface properties of mixed monolayers of sulfobetaines and ionic surfactants. *Journal of colloid and interface science.* (Estados Unidos de América): 2006. ISSN 0021-9797

Tipo de producción: Artículo**Tipo de soporte:** Revista**Posición sobre total:** 3

- 18** Delgado, C.; López-Díaz, D.; Merchán, M. D.; Velázquez, M. Effect of micelles on the dynamic Surface Tension of Zwitterionic Surfactants. *Tenside surfactants detergents.* 43, pp. 192 - 195. (Alemania): 2006. ISSN 0932-3414

Tipo de producción: Artículo**Tipo de soporte:** Revista**Posición sobre total:** 4

- 19** Delgado, C.; María Dolores Merchán Moreno; Velázquez, M.; Anaya, J. Effect of surfactant structure on the adsorption of carboxibetaines at the air-water interface. *Colloids and surfaces a-physicochemical and engineering aspects.* 280, pp. 17 - 22. (Holanda): 16/12/2005. ISSN 0927-7757

Tipo de producción: Artículo**Tipo de soporte:** Revista**Posición sobre total:** 3

- 20** Velázquez, M.; Merchán, M. D. Coloides e Interfases. pp. 1 - 473. AQUILAFUENTE, 07/2005. ISBN 84-7800-524-2

Tipo de producción: Libro**Tipo de soporte:** Libro**Posición sobre total:** 1

- 21** López-Díaz, D.; García, M. I.; Velázquez, M. Synergism in mixtures of zwitterionic and ionic surfactants. *Colloids and surfaces a-physicochemical and engineering aspects.* (Holanda): 2005. ISSN 0927-7757

Tipo de producción: Artículo**Tipo de soporte:** Revista**Posición sobre total:** 3



- 22** Velázquez, M. Langmuir Monolayers of the Zwitterionic Surfactant Hexadecyl 1-N-L-tryptophan-glycerol-ether. Journal of colloid and interface science. 283, pp. 144 - 152. (Estados Unidos de América): 2005. ISSN 0021-9797
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 1
- 23** Velázquez, M.; Francisco Ortega; Valero, M. Coloides e Interfases. Cambios estructurales en vesículas de Aerosol OT-polietilen glycol: efecto de la concentración y del peso molecular. 88, pp. 435 - 441. EDICIONES UNIVERSIDAD DE SALAMANCA, 2005.
Tipo de producción: Capítulos de libros **Tipo de soporte:** Libro
Posición sobre total: 1
- 24** María Dolores Merchán Moreno; Delgado, C.; Velázquez, M.; Anaya, J. Coloides e Interfases. Estudio de la interacción de carboxibetaínas con poli (4-estirén sulfonato sódico). pp. 159 - 165. AQUILAFUENTE, 2005. ISBN 84-7800-524-2
Tipo de producción: Capítulos de libros **Tipo de soporte:** Libro
Posición sobre total: 3
- 25** López-Díaz, D.; Velázquez, M. Coloides e Interfases. Propiedades superficiales de mezclas binarias de tensioactivos zwitteriónicos e iónicos. pp. 197 - 201. 2005. ISBN 84-7800-524-2
Tipo de producción: Capítulos de libros **Tipo de soporte:** Libro
Posición sobre total: 2
- 26** Delgado, C.; Merchán, M. D.; Velázquez, M.; S. Pegiadou; L. Pérez; M.R. Infante. The Adsorption Kinetics of 1-N-L-Tryptophan-Glycerol-Ether Surfactants at the Air-Liquid Interface: Effect of Surfactant Concentration and Alkyl Chain Length. Colloids and surfaces a-physicochemical and engineering aspects. 233, pp. 137 - 144. (Holanda): 2004. ISSN 0927-7757
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 3
- 27** Valero, M.; Velázquez, M. Effect of the addition of water-soluble polymers on the interfacial properties of Aerosol OT vesicles. Journal of colloid and interface science. 278, pp. 465 - 471. (Estados Unidos de América): 2004. ISSN 0021-9797
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2
- 28** Velázquez, M.; González, M. D. C. Recent Development in Colloids and Interface Research. Polymer effects on the structure and properties of w/o microemulsions. 1, tomo II, pp. 347 - 357. 2003. ISBN 81-7895-065-0
Tipo de producción: Capítulos de libros **Tipo de soporte:** Libro
Posición sobre total: 1
- 29** J.I. Briz; Velázquez, M. Effect of water-soluble polymers on the morphology of Aerosol Ot Vesicles. Journal of colloid and interface science. 247, pp. 437 - 446. (Estados Unidos de América): 2002. ISSN 0021-9797
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2
- 30** A.B. Pedrosa; J.I. Briz; Velázquez, M. Effect of additives on the adsorption of AOT at the air-water interface studied by equilibrium and dynamic surface tension. Journal of Surfactants and Detergents. 5, pp. 365 - 370. (Estados Unidos de América): 2002. ISSN 1097-3958
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 3



- 31** Velázquez, M.; Valero, M.; F. Ortega. Light Scattering and electrical conductivity studies of the Aerosol OT toluene water-in-oil microemulsions. *Journal of physical chemistry b.* 105, pp. 10163 - 10168. (Estados Unidos de América): 2001. ISSN 1089-5647
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 1
- 32** M.I. Viseu; Velázquez, M.; C.S. Campos; García, M. I.; S.M.B. Costa. Structural transition in a bicationic amphiphile system studied by light-scattering, conductivity and surface tension measurements. *Langmuir.* 16, pp. 4882 - 4889. (Estados Unidos de América): 2000. ISSN 0743-7463
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2
- 33** Velázquez, M.; Valero, M.; F. Ortega. Coloides e Interfases: 4ª Reunión del grupo especializado de coloides e interfases. Estructura de las microemulsiones de Aerosol OT disuelto en tolueno: efecto de las concentraciones de tensioactivo y de agua. pp. 7 - 11. 2000.
Tipo de producción: Capítulos de libros **Tipo de soporte:** Libro
Posición sobre total: 1
- 34** R. Ribera; Velázquez, M. Effect of water soluble polymers on the surface properties of 3(dimethyldodecylammonio)-propane sulfonate in aqueous solutions. *Langmuir.* 15, pp. 6686 - 6691. (Estados Unidos de América): 1999. ISSN 0743-7463
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2
- 35** González, M. D. C.; Licesio J. Rodríguez; Velázquez, M. Effect of the solvent on the water properties of Water/Oil Microemulsions. *Journal of colloid and interface science.* 211, pp. 380 - 386. (Estados Unidos de América): 1999. ISSN 0021-9797
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 3
- 36** Velázquez, M.; Valero, M.; Licesio J. Rodríguez. Determination of Thermodynamic Parameters of the Cyclodextrin Inclusion Complexes: An Undergraduate Physical Chemistry Laboratory Experiment. *Journal of chemical education.* 76, pp. 418 - 419. (Estados Unidos de América): 1999. ISSN 0021-9584
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 1
- 37** Valero, M.; S.B.M. Costa; J.R. Ascenso; Velázquez, M.; Licesio J. Rodríguez. Complexation of non-steroidal anti-inflammatory drug Nabumetone with modified and unmodified cyclodextrins. *Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry.* 35, pp. 663 - 677. (Holanda): 1999. ISSN 1388-3127
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 4
- 38** Velázquez, M. Coloides e Interfases. Aplicaciones de la espectroscopia de fluorescencia al estudio de la estructura de distintos tipos de agregados micelares. pp. 35 - 41. SERVICIO DE PUBLICACIONES UNIVERSIDAD DE ALCALÁ DE HENARES, 1998. ISBN 84-8138-250-7
Tipo de producción: Capítulos de libros **Tipo de soporte:** Libro
Posición sobre total: 1
- 39** García, M. I.; S. Pérez; Velázquez, M. Interaction between cetyl pyridinium chloride and water-soluble polymers in aqueous solutions. *Journal of colloid and interface science.* 194, pp. 356 - 363. (Estados Unidos de América): 1997. ISSN 0021-9797
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 3



- 40** González, M. D. C.; Velázquez, M.; S.M.B. Costa; P. Barreleiro. Fluorescence study of Acridone in w/o microemulsions perturbed by the addition of water-soluble polymers. *Journal of colloid and interface science*. 189, pp. 1938 - 1945. (Estados Unidos de América): 1997. ISSN 0021-9797
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2
- 41** González, M. D. C.; Licesio J. Rodríguez; Velázquez, M. Effect of the addition of water-soluble polymers on the structure of Aerosol OT Water-in-Oil microemulsions: A Fourier Transform Infrared spectroscopy study. *Langmuir*. 13, pp. 1938 - 1945. (Estados Unidos de América): 1997. ISSN 0743-7463
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 3
- 42** González, M. D. C.; Velázquez, M.; F. Ortega. Dynamic light scattering and infrared spectroscopic studies of the interaction of poly-vinylpyrrolidone polymers with Aerosol OT/isooctane water-in-oil microemulsions. *Langmuir*. 13, pp. 6095 - 6100. (Estados Unidos de América): 1997. ISSN 0743-7463
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2
- 43** Valero, M.; Velázquez, M.; Licesio J. Rodríguez. Inclusion of Non-Steroidal Anti-Inflammatory Agents into Aqueous Cyclodextrins: A UV-Absorption Spectroscopic Study. *Farmaco*. 51, pp. 525 - 533. (Suiza): 1996. ISSN 0014-827X
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2
- 44** Velázquez, M.; Valero, M.; Licesio J. Rodríguez; S.M.B. Costa; Santos, M. A. Hydrogen bonding in non-steroidal antiinflammatory drug: Naproxen. *Journal of photochemistry and photobiology b-biology*. 29, pp. 23 - 31. (Suiza): 1995. ISSN 1011-1344
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 1
- 45** González, M. D. C.; M.E. Moro; Velázquez, M.; Licesio J. Rodríguez. Binding of dibenzepin to cyclodextrins and anionic surfactants in aqueous solution. *Farmaco*. 47-5, pp. 623 - 630. (Suiza): 1992. ISSN 0014-827X
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 3
- 46** Velázquez, M.; S.M.B. Costa. A study of Fluorescencen Quenching in homomicelles and mixed micelles analysed by diffusion-controlled and fractal reaction model kinetics. *Chemical physics letters*. 190, pp. 247 - 252. (Holanda): 1992. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 1
- 47** M.E. Moro; J. Novillo Fertrell; Velázquez, M.; Licesio J. Rodríguez. Kinetics of the acid hydrolysis of Diazepam, Bromazepam, and Flunitrazepam in aqueous and micellar Systems. *Journal of pharmaceutical sciences*. 80, pp. 459 - 468. (Estados Unidos de América): 1991. ISSN 0022-3549
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 3
- 48** S.M.B. Costa; Velázquez, M.; N. Tamai; I. Yamazaki. Luminescence of porphyrins, relevance of electron transfer processes. *Journal of luminescence*. 48 & 49, pp. 341 - 351. (Holanda): 1990. ISSN 0022-2313
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2



- 49** Velázquez, M.; S.M.B. Costa. Fluorescencen Quenching of pyrene by n-hexadecyl pyridinium chloride in mixed anionic micelles. Journal of the chemical society-faraday transactions. 86, pp. 4043 - 4048. (Reino Unido): 1990. ISSN 0956-5000
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 1
- 50** Velázquez, M.; García, M. I.; F. Lorente; Valero, M.; Licesio J. Rodríguez. Fluorescence Studies on the characterization of mixed micelles. Journal of molecular liquids. 45, pp. 95 - 100. (Holanda): 1990. ISSN 0167-7322
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 1
- 51** García, M. I.; Velázquez, M.; Licesio J. Rodríguez. Critical Micelle Concentration Determination in Binary Mixtures of ionic Surfactants by Deconvolution of Conductivity/Concentration Curves. Langmuir. 6, pp. 1078 - 1083. (Estados Unidos de América): 1990. ISSN 0743-7463
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2
- 52** García, M. I.; Licesio J. Rodríguez; Velázquez, M. Estudio cinético de la neutralización de 2-nitropropano en presencia de sistemas micelares mezclados. Studia Chemica. 13, pp. 155 - 160. (España): 1988. ISSN 0370-923X
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 3
- 53** M.E. Moro; Velázquez, M.; Licesio J. Rodríguez. Deconvolution of UV absorption spectra of 1,4 benzodiazepines in aqueous solution. Journal of pharmaceutical and biomedical analysis. 6, pp. 1013 - 1018. (Reino Unido): 1988. ISSN 0731-7085
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2
- 54** C. Barbero; Velázquez, M.; Cachaza, J. M.; Licesio J. Rodríguez. Estudio termodinámico de la interacción entre cicloheptaamiloza y dibenzazepinas en disolución acuosa. Anales de química-international edition. 83, pp. 285 - 289. (España): 1987. ISSN 1130-2283
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2
- 55** A.C. Mínguez; Velázquez, M.; Licesio J. Rodríguez. Deconvolution of ultraviolet absorption spectra of tricyclic antidepressant drugs in aqueous solution. Farmaco. 42, pp. 165 - 170. (Suiza): 1987. ISSN 0014-827X
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2
- 56** P. González Hierro; Velázquez, M.; Cachaza, J. M.; Licesio J. Rodríguez. Deconvolution of ultraviolet absorption spectra of aqueous Diazepam, Flurazepam and Prazepam in acid and alkaline solutions. Journal of pharmaceutical and biomedical analysis. 5, pp. 395 - 402. (Reino Unido): 1987. ISSN 0731-7085
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2
- 57** M.E. Moro; Velázquez, M.; Cachaza, J. M.; Licesio J. Rodríguez. Solubility of diazepam and prazepam in aqueous non-ionic surfactants. Journal of pharmacy and pharmacology. 38, pp. 294 - 296. (Reino Unido): 1986. ISSN 0022-3573
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2



- 58** García, M. I.; Velázquez, M.; Licesio J. Rodríguez. Simulación Monte Carlo de una una Transición de Fase Orden-Desorden. *Studia Chemica*. 11, pp. 397 - 402. (España): 1986. ISSN 0370-923X
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2
- 59** Velázquez, M.; Licesio Rodríguez Hernandez; M^a Jesús Martín; Francisco Javier Burguillo; Carmen Sánchez González; Antonio Ceballos de Horna; Felipe Bello Estevez; Fernando González Velasco; Juan Cachaza Silveiro; Manuel García Roig; Manuel Moro. Manual de Prácticas de Laboratorio de Físicoquímica, 2^a ed. Cap. 12 a 15. pp. 55 - 72. 1986.
Tipo de producción: Capítulos de libros **Tipo de soporte:** Libro
Posición sobre total: 1
- 60** P. González Hierro; Velázquez, M.; Cachaza, J. M.; Licesio J. Rodríguez. Estudio espectrofotométrico y análisis de bandas de Prazepam en disolución acuosa. *Studia Chemica*. 11, pp. 511 - 518. (España): 1986. ISSN 0370-923X
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2
- 61** M.E. Moro; Velázquez, M.; Licesio J. Rodríguez. Estudio cinético de la hidrólisis ácida de Flurazepam. *Studia Chemica*. 11, pp. 519 - 526. (España): 1986. ISSN 0370-923X
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2
- 62** M. Moro; Velázquez, M.; Licesio J. Rodríguez. Estudio cinético de la hidrólisis ácida de Fluorazepam. *Studia Chemica*. 11, pp. 519 - 526. (España): 1986. ISSN 0370-923X
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 2
- 63** Velázquez, M.; Antonio Ceballos de Horna; Carmen Sánchez González; Felipe Bello Estevez; Fernando González Velasco; Francisco Javier Burguillo; Juan Cachaza Silveiro; Licesio Rodríguez Hernandez; M^a Jesús Martín; Manuel García Roig; Manuel Moro. Manual de Prácticas de laboratorio de Técnicas Instrumentales 2ed. Cap 3 y 4. 1986.
Tipo de producción: Capítulos de libros **Tipo de soporte:** Libro
Posición sobre total: 1
- 64** Velázquez, M.; García, M. I.; Cachaza, J. M.; Licesio J. Rodríguez. Estudio cinético de la Catálisis Micelar sobre reacciones de transferencia protónica en disolución acuosa. *N A C C Biología-(Nova Acta Científica Compostelana)*. 22, pp. 571 - 583. (España): 1985. ISSN 1130-9717
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 1
- 65** Velázquez, M.; García, M. I.; M.A. Herráez; Licesio J. Rodríguez. Pseudo-Phase Ion-Exchange Model for Micellar Catálisis in the Acid Hydrolysis of Vinyl Ethers. *International journal of chemical kinetics*. 16, pp. 269 - 276. (Estados Unidos de América): 1984. ISSN 0538-8066
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 1
- 66** Cachaza, J. M.; L. Rodríguez; Ceballos, A.; M.C. Sánchez; Velázquez, M.; M.J. Martín; Salvador, F.; Calle, E.; A. Del Arco. Manual de prácticas de laboratorio de fisicoquímica. Cap. 12 a 15. pp. 55 - 72. EDICIONES UNIVERSIDAD DE SALAMANCA, 1982.
Tipo de producción: Capítulos de libros **Tipo de soporte:** Libro
Posición sobre total: 5



- 67** Velázquez, M.; Antonio Ceballos de Horna; Carmen Sánchez González; Fernando González Velasco; Francisco Javier Burguillo; Juan Cachaza Silveiro; Licesio Rodríguez Hernández; M^a Jesús Martín. Manual de Prácticas de laboratorio de Técnicas Instrumentales. Cap.3 y 4. pp. 21 - 39. 1982.
Tipo de producción: Capítulos de libros **Tipo de soporte:** Libro
Posición sobre total: 1
- 68** Velázquez, M. Estudio cinético y mecanismos de catálisis micelar: reacción de hidrólisis ácida de éteres vinílicos en presencia de agregados micelares. (España): UNIVERSIDAD DE SALAMANCA, 1982.
Tipo de producción: Libro **Tipo de soporte:** Libro
Posición sobre total: 1
- 69** García, M. I.; M.A. Herráez; M. Rodrigo; Licesio J. Rodríguez; Velázquez, M. Catalysis by Micelles and by Cycloamyloses: A Comparative Set of Kinetic Experiments. Journal of chemical education. 58, pp. 584 - 585. (Estados Unidos de América): 1981. ISSN 0021-9584
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 5
- 70** M.A. Herráez; Licesio J. Rodríguez; M. Rodrigo; Velázquez, M. Estudio cinético de la reacción de neutralización de nitroetano en presencia de sistemas micelares. Anales de química-international edition. 75, pp. 310 - 312. (España): 1979. ISSN 1130-2283
Tipo de producción: Artículo **Tipo de soporte:** Revista
Posición sobre total: 4

Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **Título:** Modulation of film morphology at nanoscale by Dipping, Langmuir-Blodgett and Langmuir-Schaefer
Nombre del congreso: 5th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces (RICI5)
Ámbito del congreso: Internacional no UE
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: DONOSTIA-SAN SEBASTIAN, España
Fecha de realización: 26/06/2013
Fecha de finalización: 28/06/2013
Ciudad: DONOSTIA-SAN SEBASTIAN, España
Merchán, M. D.; Teresa Alejo; Velázquez, M. ISBN 978-84-9860-832-8
- 2** **Título:** QDs onto Polymer and Surfactant self-assembled Films: A Quartz Crystal Microbalance Study
Nombre del congreso: 5th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces (RICI5)
Ámbito del congreso: Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de realización: DONOSTIA-SAN SEBASTIAN, España
Fecha de realización: 26/06/2013
Fecha de finalización: 28/06/2013
Ciudad: DONOSTIA-SAN SEBASTIAN, España
Teresa Alejo; Merchán, M. D.; Velázquez, M. ISBN 978-84-338-5131-4
- 3** **Título:** Shearing as a Driven Force to Assembly Nanocomposites Films
Nombre del congreso: 5th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, RICI5
Ámbito del congreso: Unión Europea
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de realización: San Sebastián, España
Fecha de realización: 26/06/2013



Fecha de finalización: 28/06/2013

Ciudad: San Sebastián, España

Beatriz Martín García; Velázquez, M. "5th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces, RIC15". ISBN 978-84-9860-832-8

4 Título: Langmuir-Blodgett and Langmuir-Schaefer Films of GRAnPH: The Role of Oxidative Debris.

Nombre del congreso: Imagenenano 2013 (Graphene 2013)

Ámbito del congreso: Internacional no UE

Tipo de participación: Otros

Ciudad de realización: BILBAO, España

Fecha de realización: 23/04/2013

Fecha de finalización: 26/04/2013

Ciudad: BILBAO, España

López-Díaz, D.; Santiago Blanco; Pilar Merino; Ana Pérez; César Merino; Velázquez, M.

5 Título: Graphene Oxide GRAnPH® obtained by oxidation of carbon nanofibers GANF ®: The Role of oxidative Debris in the material properties

Nombre del congreso: Graphene: A mobilizing action in an emerging field. Closing Meeting

Ámbito del congreso: Internacional no UE

Tipo de participación: Ponencia invitada

Ciudad de realización: MADRID, España

Fecha de realización: 02/04/2013

Fecha de finalización: 04/04/2013

Ciudad: MADRID, España

López-Díaz, D.; Velázquez, M.

6 Título: Photoluminescence of CdSe QDs / polymer LB films by Fluorescence Lifetime Microscopy

Nombre del congreso: XXIV IUPAC Symposium on Photochemistry

Ámbito del congreso: Internacional no UE

Tipo de participación: Ponencia

Ciudad de realización: Coimbra, Portugal

Fecha de realización: 15/07/2012

Fecha de finalización: 20/07/2012

Ciudad: Coimbra, Portugal

Beatriz Martín García; Pedro M.R. Paulo; Silvia M.B. Costa; Velázquez, M.

7 Título: Adsorption Study of QDs in Self- assembled Polymer and Surfactant Films

Nombre del congreso: NANAX5

Ámbito del congreso: Internacional no UE

Tipo de participación: Póster

Ciudad de realización: FUENGIROLA, España

Fecha de realización: 07/05/2012

Fecha de finalización: 11/05/2012

Ciudad: FUENGIROLA, España

Teresa Alejo; Merchán, M. D.; Velázquez, M.

8 Título: Dynamic Properties of CdSe QDs/Copolymer Films at the air-water interface

Nombre del congreso: NANAX 5

Ámbito del congreso: Internacional no UE

Tipo de participación: Póster

Ciudad de realización: FUENGIROLA, España



Fecha de realización: 07/05/2012
Fecha de finalización: 11/05/2012
Ciudad: FUENGIROLA, España
Beatriz Martín García; Velázquez, M.

9 Título: Assembly and Properties of QDs Thin Films

Nombre del congreso: IMAGINENANO 2011
Ámbito del congreso: Internacional no UE
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: BILBAO, España
Fecha de realización: 11/04/2011
Fecha de finalización: 14/04/2011
Ciudad: BILBAO, España
Teresa Alejo; Velázquez, M.; Merchán, M. D.

10 Título: Chemically converted Graphene Nanosheets: Langmuir-Blodgett Deposition

Nombre del congreso: ImagineNano 2011
Ámbito del congreso: Internacional no UE
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: BILBAO, España
Fecha de realización: 11/04/2011
Fecha de finalización: 14/04/2011
Ciudad: BILBAO, España

Beatriz Martín García; Velázquez, M.; Diez, E.; Vittorio Bellani; Francesco Rossella; José Antonio Pérez Hernández; Juan Hernández Toro. "ImagineNano 2011". FUNDACION PHANTOMS PCM PABELLON C, ISBN BI-943/2011

11 Título: From graphite to graphene: Chemical strategies

Nombre del congreso: International Soft Matter Conference 2010
Ámbito del congreso: Internacional no UE
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: GRANADA, España
Fecha de realización: 05/07/2010
Fecha de finalización: 08/07/2010
Ciudad: GRANADA, España

Beatriz Martín García; Velázquez, M.; Diez, E.; Francesco Rossella; Vittorio Bellani. "International Soft Matter Conference 2010". SERVICIO DE REPROGRAFÍA UNIVERSIDAD DE GRANADA, ISBN 978-84-338-5131-4

12 Título: Langmuir and Langmuir-Blodgett Films of Gemini Surfactant and Polymer

Nombre del congreso: INTERNATIONAL SOFT MATTER CONFERENCE 2010
Ámbito del congreso: Internacional no UE
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: GRANADA, España
Fecha de realización: 05/07/2010
Fecha de finalización: 08/07/2010
Ciudad: GRANADA, España

Teresa Alejo; Velázquez, M.; Merchán, M. D. ISBN 978-84-338-5131-4



- 13** **Título:** Properties of Mixed Langmuir Films of CdSe Quantum Dots and 18-2-18 Gemini Surfactant
Nombre del congreso: 10th European Conference on Atoms Molecules and Photons
Ámbito del congreso: Unión Europea
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: SALAMANCA, España
Fecha de realización: 04/07/2010
Fecha de finalización: 09/07/2010
Ciudad: SALAMANCA, España
Teresa Alejo; Velázquez, M.; Merchán, M. D.
- 14** **Título:** Characterization of CdSe quantum dots-copolymer systems
Nombre del congreso: 10th European Conference on Atoms Molecules and Photons (ECAMP-X)
Ámbito del congreso: Unión Europea
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: SALAMANCA, España
Fecha de realización: 04/07/2010
Fecha de finalización: 09/07/2010
Ciudad: SALAMANCA, España
Beatriz Martín García; Velázquez, M.
- 15** **Título:** Langmuir Monolayers of a Cationic Gemini Surfactant on Various Ion-Containing Subphases
Nombre del congreso: VIII Reunión del Grupo especializado de Coloides e interfases (GECI) y III Reunión Ibérica de Coloides e Interfases (RICI)
Ámbito del congreso: Unión Europea
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: GRANADA, España
Fecha de realización: 13/07/2009
Fecha de finalización: 15/07/2009
Ciudad: GRANADA, España
Teresa Alejo; Velázquez, M.; Merchán, M. D. pp. 205 - 206. ISBN 978-84-338-5027-0
- 16** **Título:** Effect of Electrolytes on the Langmuir Monolayers of a Block Copolymer derived of Maleic Anhydride
Nombre del congreso: III REUNIÓN IBERICA DE COLOIDES E INTERFASES
Ámbito del congreso: Unión Europea
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de realización: GRANADA, España
Fecha de realización: 12/07/2009
Fecha de finalización: 15/07/2009
Ciudad: GRANADA, España
Beatriz Martín García; Velázquez, M. "Actas III Reunión Ibérica de Coloides e Interfases (RICI), VIII Reunión del Grupo Especializado de Coloides e Interfases (GECI)". SERVICIO DE REPROGRAFÍA UNIVERSIDAD DE GRANADA, ISBN 978-84-338-50
- 17** **Título:** Zwitterionic surfactants monolayers: Effect of the addition of polyelectrolytes
Nombre del congreso: 17th International Conference "Surfactants in Solution"
Ámbito del congreso: Internacional no UE
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: Berlin, Alemania
Fecha de realización: 17/08/2008
Fecha de finalización: 22/08/2008
Ciudad: Berlin, Alemania



Merchán, M. D.; Velázquez, M.

- 18** **Título:** A dynamic Light scattering study of spontaneous vesicles of Aerosol OT
Nombre del congreso: IUPAC Conference on Physical Chemistry
Ámbito del congreso: Internacional no UE
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: SANTIAGO DE COMPOSTELA, España
Fecha de realización: 13/07/2008
Fecha de finalización: 18/07/2008
Ciudad: SANTIAGO DE COMPOSTELA, España
Velázquez, M.; Francisco Ortega.
- 19** **Título:** Effect of the polymer structure on the 2D glass transition
Nombre del congreso: 19th IUPAC Conference on Physical Organic Chemistry
Ámbito del congreso: Internacional no UE
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: SANTIAGO DE COMPOSTELA, España
Fecha de realización: 13/07/2008
Fecha de finalización: 18/07/2008
Ciudad: SANTIAGO DE COMPOSTELA, España
Beatriz Martín García; López-Díaz, D.; Velázquez, M.
- 20** **Título:** Properties of monolayers of carboxobetaines with PSS
Nombre del congreso: III INTERNATIONAL WORKSHOP BUBBLE AND DROP INTERFACES
Ámbito del congreso: Internacional no UE
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: GRANADA, España
Fecha de realización: 25/03/2007
Fecha de finalización: 28/03/2007
Ciudad: GRANADA, España
Merchán, M. D.; Velázquez, M.; Delgado, C.; FRANCISCO MONROY; FRANCISCO ORTEGA; RAMON GONZÁLEZ RUBIO.
- 21** **Título:** Temperature influence on the dynamic of polymer monolayers
Nombre del congreso: III Internacional Workshop Bubble and Drop Interfaces
Ámbito del congreso: Internacional no UE
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: GRANADA, España
Fecha de realización: 25/03/2007
Fecha de finalización: 28/03/2007
Ciudad: GRANADA, España
López-Díaz, D.; Velázquez, M.
- 22** **Título:** Cambios estructurales en las vesículas de aerosol-OT-polietilenglicol:efecto de la concentración y el peso molecular del polímero
Nombre del congreso: VI Reunión Española y I Portuguesa del grupo especializado de coloides e interfases (VIGECI,IRICI)
Ámbito del congreso: Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: España
Fecha de realización: 13/07/2005



Fecha de finalización: 15/07/2005

Ciudad: SALAMANCA, España

Valero, M.; Velázquez, M.; Francisco Ortega. "Cambios estructurales en las vesículas de aerosol-OT-polietilenglicol:efecto de la concentración y el peso molecular del polímero".

- 23** **Título:** Estudio de la interacción de carboxibetaínas con poli(4-estirén sulfonato sódico)
Nombre del congreso: VI Reunión del grupo especializado de coloides e interfases, 1ª Reunión Ibérica de coloides e interfases
Ámbito del congreso: Unión Europea
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: España
Fecha de realización: 13/07/2005
Fecha de finalización: 15/07/2005
Ciudad: SALAMANCA, España
Delgado, C.; Merchán, M. D.; Anaya, J.; Velázquez, M."Estudio de la interacción de carboxibetaínas con poli(4-estirén sulfonato sódico)". pp. 159 - 165. AQUILAFUENTE, ISBN 84-7800-524-2
- 24** **Título:** Propiedades superficiales de mezclas binarias de tensioactivos zwitteriónicos e iónicos
Nombre del congreso: VI Reunión del Grupo de Coloides e Interfases y 1º Reunión Ibérica de Coloides e Interfases
Ámbito del congreso: Unión Europea
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: SALAMANCA, España
Fecha de realización: 13/07/2005
Fecha de finalización: 15/07/2005
Ciudad: SALAMANCA, España
López-Díaz, D.; Velázquez, M."Coloides E Interfases". 88, pp. 1 - 473. AQUILAFUENTE, ISBN 84-7800-524-2
- 25** **Título:** Synergism in mixtures containing zwitterionic and ionic surfactants
Nombre del congreso: 18th Conference of the European Colloid and Interface Society
Ámbito del congreso: Internacional no UE
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: ALMERIA, España
Fecha de realización: 19/09/2004
Fecha de finalización: 24/09/2004
Ciudad: ALMERIA, España
López-Díaz, D.; García, M. I.; Velázquez, M.
- 26** **Título:** Adsorption of betaines at the air-water interface study: effect of the charge and of the addition of electrolytes and polyelectrolytes
Nombre del congreso: 18th conference of the european colloid and interface society
Ámbito del congreso: Unión Europea
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: España
Fecha de realización: 19/09/2004
Fecha de finalización: 24/09/2004
Ciudad: ALMERIA, España
Delgado, C.; Merchán, M. D.; Velázquez, M."Adsorption of betaines at the air-water interface study: effect of the charge and of the addition of electrolytes and polyelectrolytes".



- 27** **Título:** Monolayers of a zwitterionic surfactant. Effect of pH on the static and rheological properties
Nombre del congreso: 17 ECIS Conference
Ámbito del congreso: Otros
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: FLORENCIA, Italia
Fecha de realización: 2003
Fecha de finalización: 31/12/2003
Ciudad: FLORENCIA, Italia
Velázquez, M.; F. Ortega; Raquel García Rubio; S. Pegiadou; L. Pérez; M.R. Infante.
- 28** **Título:** Origen de la Barrera de activación en la adsorción de Tensioactivos derivados de Triptófano en la interfase agua-aire
Nombre del congreso: 4a Reunión Nacional del grupo especializado de coloides e interfases
Ámbito del congreso: Nacional
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: VIGO, España
Fecha de realización: 2003
Fecha de finalización: 31/12/2003
Ciudad: VIGO, España
Delgado, C.; Merchán, M. D.; Velázquez, M.; S. Pegiadou; L. Pérez; M.R. Infante.
- 29** **Título:** Adsorbed layer properties of binary mixtures containing zwitterionic and ionic surfactants
Nombre del congreso: 14th Surfactants In Solution Symposium
Ámbito del congreso: Internacional no UE
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: BARCELONA, España
Fecha de realización: 09/06/2002
Fecha de finalización: 14/06/2002
Ciudad: BARCELONA, España
López-Díaz, D.; García, M. I.; Velázquez, M.
- 30** **Título:** Adsorbed Layer properties of binary mixtures containing zwitterionic and ionic surfactants
Nombre del congreso: 14th Surfactants in Solution Symposium
Ámbito del congreso: Otros
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: BARCELONA, España
Fecha de realización: 2002
Fecha de finalización: 31/12/2002
Ciudad: BARCELONA, España
D. López; García, M. I.; Velázquez, M.
- 31** **Título:** Dynamic surface tension of 1-N-1tryptophan-glycerol-ether surfactants
Nombre del congreso: 14th Surfactants in Solution Symposium
Ámbito del congreso: Internacional no UE
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: España
Fecha de realización: 2002
Fecha de finalización: 31/12/2002
Ciudad: BARCELONA, España
Delgado, C.; Merchán, M. D.; Velázquez, M.



- 32** **Título:** Estructura de las microemulsiones de Aerosol OT disuelto en tolueno: efecto de las concentraciones de tensioactivo y agua
Nombre del congreso: 4º Reunión Nacional del grupo especializado de coloides e interfases
Ámbito del congreso: Nacional
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: BARCELONA, España
Fecha de realización: 07/2000
Fecha de finalización: 31/07/2000
Ciudad: BARCELONA, España
Velázquez, M.; Valero, M.; F. Ortega.
- 33** **Título:** Effect of additives on the adsorption of Aerosol OT at the air-water interface
Nombre del congreso: XV Conference of European Colloid and Interface Society
Ámbito del congreso: Unión Europea
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: COIMBRA, Portugal
Fecha de realización: 2000
Fecha de finalización: 31/12/2000
Ciudad: COIMBRA, Portugal
Velázquez, M.; A.B. Pedrosa; J.I. Briz.
- 34** **Título:** Interaction between 3-(dymethyl-dodecyl ammonio) propane sulfonate and water soluble polymers in aqueous solutions
Nombre del congreso: 4th Liquid Matter Conference
Ámbito del congreso: Otros
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: GRANADA, España
Fecha de realización: 1999
Fecha de finalización: 31/12/1999
Ciudad: GRANADA, España
Velázquez, M.; R. Ribera.
- 35** **Título:** Light Scattering, Conductivity and Surface Tensión Studies in a Bi-Cationic Amphiphile System which forms Vesicles
Nombre del congreso: 4th Liquid Matter Conference
Ámbito del congreso: Otros
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: GRANADA, España
Fecha de realización: 1999
Fecha de finalización: 31/12/1999
Ciudad: GRANADA, España
M.I. Viseu; Velázquez, M.; C.S. Campos; García, M. I.; S.M.B. Costa.
- 36** **Título:** Inclusion of an anti-inflammatory non steroidal drug, Nabumetone in cyclodextrins
Nombre del congreso: 17th IUPAC Symposium on Photochemistry
Ámbito del congreso: Nacional
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: BARCELONA, España
Fecha de realización: 07/1998
Fecha de finalización: 31/07/1998
Ciudad: BARCELONA, España



Valero, M.; S.M.B. Costa; Velázquez, M.; Licesio J. Rodríguez.

- 37** **Título:** Interacción de Cloruro de Cetil Piridinio con Polímeros derivados de Etilen Glicol y Vinil Pirrolidona
Nombre del congreso: 26 Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Ámbito del congreso: Nacional
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: CADIZ, España
Fecha de realización: 1997
Fecha de finalización: 31/12/1997
Ciudad: CADIZ, España
García, M. I.; S. Pérez; Velázquez, M.
- 38** **Título:** Aplicaciones de la espectroscopia de fluorescencia al estudio de la estructura de distintos tipos de agregados micelares
Nombre del congreso: Curso sobre coloides e interfases
Ámbito del congreso: Otros
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: SIGUENZA, España
Fecha de realización: 1996
Fecha de finalización: 31/12/1996
Ciudad: SIGUENZA, España
Velázquez, M.
- 39** **Título:** Effect of the water-soluble polymers on the structure of water-in-oil microemulsions Vesicles
Nombre del congreso: IXth European Colloid and Interface Science
Ámbito del congreso: Unión Europea
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: BARCELONA, España
Fecha de realización: 09/1995
Fecha de finalización: 30/09/1995
Ciudad: BARCELONA, España
Velázquez, M.; González, M. D. C.; F. Ortega.
- 40** **Título:** Fluorescencia de Acridona en micelas de AOT disuelto en tolueno
Nombre del congreso: 25 Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Ámbito del congreso: Otros
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: Vitoria, España
Fecha de realización: 09/1994
Fecha de finalización: 30/09/1994
Ciudad: Vitoria, España
Velázquez, M.; González, M. D. C.
- 41** **Título:** Estudio estructural de micelas formadas por mezclas tensioactivo-polímero en medio no acuoso mediante espectroscopia FT-IR. Propiedades, caracterización y aplicaciones de los Sistemas Coloidales
Nombre del congreso: Curso-Simposio sobre propiedades, caracterización y aplicación de los sistemas coloidales
Ámbito del congreso: Nacional
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de realización: ALCALA DE HENARES, España
Fecha de realización: 07/1993



Fecha de finalización: 31/07/1993
Ciudad: ALCALA DE HENARES, España
Velázquez, M.; González, M. D. C.; Licesio J. Rodríguez.

- 42** **Título:** Efecto de la polaridad del disolvente en el espectro uv de antiinflamatorios y aplicación al estudio de la interacción con ciclodextrinas
Nombre del congreso: 24 Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Ámbito del congreso: Nacional
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: MALAGA, España
Fecha de realización: 09/1992
Fecha de finalización: 30/09/1992
Ciudad: MALAGA, España
Velázquez, M.; Valero, M.; Licesio J. Rodríguez.
- 43** **Título:** Fluorescence studies on the characterization of mixed micelles
Nombre del congreso: 19th European congress on molecular spectroscopy
Ámbito del congreso: Unión Europea
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: DRESDEN, Alemania
Fecha de realización: 04/09/1989
Fecha de finalización: 08/09/1989
Ciudad: DRESDEN, Alemania
Velázquez, M.; García, M. I.; F. Lorente; Valero, M.; Licesio J. Rodríguez.
- 44** **Título:** Caracterización de micelas mixtas aniónicas mediante espectrofluorimetría
Nombre del congreso: XI Reunión Nacional de Espectroscopía
Ámbito del congreso: Nacional
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: Alicante, España
Fecha de realización: 1988
Fecha de finalización: 31/12/1988
Ciudad: Alicante, España
Velázquez, M.; García, M. I.; F. Lorente; Licesio J. Rodríguez.
- 45** **Título:** Efecto que produce la presencia de tensioactivos aniónicos sobre la velocidad de hidrólisis ácida de Bromazepam
Nombre del congreso: XXII Reunión Bienal de la RSEQ
Ámbito del congreso: Otros
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: MURCIA, España
Fecha de realización: 1988
Fecha de finalización: 31/12/1988
Ciudad: MURCIA, España
M.E. Moro; Velázquez, M.; J. Novillo; Licesio J. Rodríguez.
- 46** **Título:** Estudio cinético de la catálisis micelar en mezclas binarias de tensioactivos
Nombre del congreso: XI Encontro Anual da sociedades portuguesa de química
Ámbito del congreso: Nacional
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: Lisboa, Portugal



Fecha de realización: 1988
Fecha de finalización: 31/12/1988
Ciudad: Lisboa, Portugal
Velázquez, M.; García, M. I.; Licesio J. Rodríguez.

- 47** **Título:** Nueva metodología de detrmnación de la cmc en mezclas binarias de tensioactivos
Nombre del congreso: XXII Reunión Bienal de la RSEQ
Ámbito del congreso: Otros
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: MURCIA, España
Fecha de realización: 1988
Fecha de finalización: 31/12/1988
Ciudad: MURCIA, España
Velázquez, M.; García, M. I.; F. Lorente; Licesio J. Rodríguez.
- 48** **Título:** Spectroscopic studies of zinc tetraphenyl porphyrin derivatives in cationic reversed micelles
Nombre del congreso: Seventh international conference on photochemical conversión and storage of solar energy
Ámbito del congreso: Internacional no UE
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: CHICAGO, Estados Unidos de América
Fecha de realización: 1988
Fecha de finalización: 31/12/1988
Ciudad: CHICAGO, Estados Unidos de América
S.M.B. Costa; Velázquez, M.; N. Tamai; I. Yamazaki.
- 49** **Título:** Deconvolution of uv absorption spectra of aqueous 1,4 benzodiazepines
Nombre del congreso: International Symposium on pharmaceutical and biomedical analysis
Ámbito del congreso: Internacional no UE
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: BARCELONA, España
Fecha de realización: 1987
Fecha de finalización: 31/12/1987
Ciudad: BARCELONA, España
M.E. Moro; Velázquez, M.; Licesio J. Rodríguez.
- 50** **Título:** Estudio cinético de la hidrólisis ácida de1,4 benzodiazepinas en presencia de agregados micelares
Nombre del congreso: I Reunión española de biofísica
Ámbito del congreso: Nacional
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: SITGES, España
Fecha de realización: 1986
Fecha de finalización: 31/12/1986
Ciudad: SITGES, España
García, M. I.; Velázquez, M.; C. Barbero; Licesio J. Rodríguez.
- 51** **Título:** Formación de micelas en mezclas de tensioactivos catiónicos
Nombre del congreso: I Reunión española de biofísica
Ámbito del congreso: Nacional
Tipo de participación: Póster
Ciudad de realización: SITGES, España



Fecha de realización: 1986

Fecha de finalización: 31/12/1986

Ciudad: SITGES, España

García, M. I.; Velázquez, M.; C. Barbero; Licesio J. Rodríguez.

52 Título: Estudio termodinámico de la complejación de cicloheptaamilosa con neurolépticos en disolución acuosa

Nombre del congreso: 6a Escuela de verano mediterránea sobre las interfases y el enlace químico

Ámbito del congreso: Otros

Tipo de participación: Ponencia invitada

Ciudad de realización: SALAMANCA, España

Fecha de realización: 1985

Fecha de finalización: 31/12/1985

Ciudad: SALAMANCA, España

Velázquez, M.; C. Barbero; García, M. I.; Licesio J. Rodríguez; Cachaza, J. M.

53 Título: Solubilization des médicaments dans les systemes micellaires: interactions des 1,4 benzodiazepines avec les detergents non ioniques

Nombre del congreso: 10e Forum des Jeunes chercheurs

Ámbito del congreso: Otros

Tipo de participación: Póster

Ciudad de realización: STRASBOURG, Francia

Fecha de realización: 1983

Fecha de finalización: 31/12/1983

Ciudad: STRASBOURG, Francia

Velázquez, M.; M.E. Moro; Licesio J. Rodríguez; Cachaza, J. M.

54 Título: Modelo para la catálisis e inhibición de reacciones orgánicas en sistemas micelares

Nombre del congreso: XIX Reunión Bienal de RSEQ

Ámbito del congreso: Otros

Tipo de participación: Póster

Ciudad de realización: SANTANDER, España

Fecha de realización: 1982

Fecha de finalización: 31/12/1982

Ciudad: SANTANDER, España

Velázquez, M.; Licesio J. Rodríguez; García, M. I.; M.A. Herraiz.

55 Título: Estudio cinético de la catálisis micelar en las reacciones de hidrólisis ácida de éteres vinílicos

Nombre del congreso: X coloquio sobre problemas de investigación y docencia en Química-Física

Ámbito del congreso: Otros

Tipo de participación: Póster

Ciudad de realización: VALLADOLID, España

Fecha de realización: 1981

Fecha de finalización: 31/12/1981

Ciudad: VALLADOLID, España

Velázquez, M.; Licesio J. Rodríguez; M.A. Herraiz.

56 Título: Micellar catalysis of the hydrolysis reaction of vinyl ethers

Nombre del congreso: 4º Encontro anual da sociedade portuguesa de química

Ámbito del congreso: Nacional

Tipo de participación: Póster



Ciudad de realización: LISBOA, Portugal

Fecha de realización: 1981

Fecha de finalización: 31/12/1981

Ciudad: LISBOA, Portugal

M.A. Herraéz; Licesio J. Rodríguez; Velázquez, M.

Experiencias en gestión de I+D+i y participación en comités científicos

Experiencia en organización de actividades de I+D+i

- 1** **Título:** Apresentação da pesquisa do GIR de Coloides e Interfases de la USAL en el XIV Encontro de reitores del grupo Tordesillas
Tipo de actividad: Conferencia (Impartida) **Ámbito de la actividad:** Internacional no UE
Fecha de inicio: 10/11/2013
- 2** **Título:** Participación en las jornadas de difusión de la Univeridad de Salamanca: Películas Langmuir-Blodgett de Grafeno
Tipo de actividad: Jornada **Ámbito de la actividad:** Otros
Fecha de inicio: 05/07/2013
- 3** **Título:** 5th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces
Tipo de actividad: Congreso
Fecha de inicio: 27/06/2013
- 4** **Título:** 5th Iberian Meeting on Colloids and Interfaces
Tipo de actividad: Congreso **Ámbito de la actividad:** Unión Europea
Fecha de inicio: 26/06/2013
- 5** **Título:** Reunión de Científicos Brasileños y Españoles (RCEB)
Tipo de actividad: Conferencia (Impartida) **Ámbito de la actividad:** Internacional no UE
Fecha de inicio: 13/01/2011
- 6** **Título:** Nanofutures: The European Technology Integration and Innovation Platform (ETIP) in Nanotechnology,
Tipo de actividad: Otros **Ámbito de la actividad:** Unión Europea
Fecha de inicio: 15/06/2010
- 7** **Título:** 1ª Reunión Ibérica de Coloides e Interfases
Tipo de actividad: Congreso **Ámbito de la actividad:** Unión Europea
Fecha de inicio: 01/07/2005
- 8** **Título:** 14th Surfactants in Solution Symposium
Tipo de actividad: Congreso **Ámbito de la actividad:** Internacional no UE
Fecha de inicio: 01/07/2002
- 9** **Título:** 4a Reunión Nacional del grupo especializado de coloides e interfases
Tipo de actividad: Congreso
Fecha de inicio: 01/07/2000



Otros méritos

Estancias en centros de I+D+i públicos o privados

- 1 Entidad de realización:** Departamento de Química Física I Universidad Complutense Madrid
Ciudad: Departamento de Química Física I Universidad Complutense Madrid, España
Fecha inicio: 08/01/2008, 4 días
Objetivo de la estancia: Invitado/a
Tareas contrastables: Medidas de dispersión de luz: estudio de la transición de fase: vesícula-micela
- 2 Entidad de realización:** Química Física I Universidad Complutense de Madrid
Ciudad: Química Física I Universidad Complutense de Madrid, España
Fecha inicio: 11/12/2006, 1 mes - 9 días
Objetivo de la estancia: Invitado/a
Tareas contrastables: Medidas de dispersión de luz: estudio de la transición de fase: vesícula-micela
- 3 Entidad de realización:** Departamento de Química Física I, Universidad Complutense de Madrid
Ciudad: Departamento de Química Física I, Universidad Complutense de Madrid, España
Fecha inicio: 01/01/2002, 7 meses
Objetivo de la estancia: Invitado/a
Tareas contrastables: Estudio reológico y estructural de monocapas insolubles
- 4 Entidad de realización:** Centro de Química Estructural, Instituto Superior Técnico
Ciudad: Centro de Química Estructural, Instituto Superior Técnico, Portugal
Fecha inicio: 01/06/1992, 2 meses
Objetivo de la estancia: Invitado/a
Tareas contrastables: Química de Estados excitados en interfaces
- 5 Entidad de realización:** Centro de Química Estructural, Instituto Superior Técnico
Ciudad: Centro de Química Estructural, Instituto Superior Técnico, Portugal
Fecha inicio: 01/01/1989, 2 años
Objetivo de la estancia: Posdoctoral
Tareas contrastables: Reacciones de transferencia electrónica en medios micelares
- 6 Entidad de realización:** Centro de Química Estructural, Instituto Superior Técnico
Ciudad: Centro de Química Estructural, Instituto Superior Técnico, Portugal
Fecha inicio: 01/01/1987, 7 meses
Objetivo de la estancia: Posdoctoral
Tareas contrastables: Reacciones de transferencia electrónica en medios micelares



Número de tramos de investigación reconocidos

N.º de tramos reconocidos: 4

Resumen de otros méritos

- 1 Descripción del mérito:** Publicación electrónica en e-newsletters; GRAnPH: High quality graphene oxide obtained from GANF carbon nanofibres
Fecha de concesión: 01/09/2013
- 2 Descripción del mérito:** Presidente de la Junta electoral de centro de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad de Salamanca
Fecha de concesión: 01/03/2010
- 3 Descripción del mérito:** Miembro del Consejo de Investigación
Entidad que acredita: Universidad de Salamanca
Fecha de concesión: 01/03/2009
- 4 Descripción del mérito:** Forma parte de la Red temática de Transferencia Tecnológica COLINTER financiada por el Ministerio de Educación y Ciencia como la acción complementaria de referencia CTQ2006-27199-E/ PPQ
Entidad que acredita: Ministerio de educación y Ciencia
Fecha de concesión: 01/01/2006
- 5 Descripción del mérito:** Miembro de la American Chemical Society
Fecha de concesión: 01/01/2006
- 6 Descripción del mérito:** Vicepresidenta del Grupo especializado de Coloides e Interfases de las Reales Sociedades Españolas de Química y de Física
Fecha de concesión: 01/07/2005
- 7 Descripción del mérito:** Forma parte como Científico Colaborador del grupo de investigación de excelencia 910591, Grupo de sistema complejos: coloides, polímeros e interfases, de la Universidad Complutense de Madrid.
Entidad que acredita: UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID
Fecha de concesión: 01/01/2005
- 8 Descripción del mérito:** Miembro numerario de la R.S.E.F.
Fecha de concesión: 01/01/2005
- 9 Descripción del mérito:** Está en posesión del título de European Chemistry
Fecha de concesión: 01/01/1994
- 10 Descripción del mérito:** Ayuda del Ministerio de Educación y Ciencia dentro del programa de perfeccionamiento y movilidad del personal investigador para estancia en el Instituto Superior Técnico de Lisboa



Fecha de concesión: 01/09/1989

11 Descripción del mérito: Miembro numerario de la R.S.E.Q.

Fecha de concesión: 01/01/1989

12 Descripción del mérito: Becaria de la Junta Nacional de Investigaçao científica e tecnologia del gobierno Portugués para apoyo a la estancia en Portugal de científicos extranjeros

Fecha de concesión: 01/01/1987