



DAVID QUIÑONERO SANTIAGO

Generat des de: Universitat de les Illes Balears

Data del document: 14/10/2021

v 1.4.0

e18c43b33a46f6250dfc5f5fdf1fd1b2

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/>

**DAVID QUIÑONERO SANTIAGO**

Cognoms: **QUIÑONERO SANTIAGO**
Nom: **DAVID**
DNI: **43087158Q**
ORCID: **0000-0002-9661-9881**
ResearcherID: **N-4765-2015**
Data de naixement: **23/04/1974**
Sexe: **Home**
Nacionalitat: **Espanya**
País de naixement: **Espanya**
Ciutat de naixement: **Palma (BALEARS)**
Adreça de contacte: **Universitat de les Illes Balears Departament de Química Cra. de Valldemossa km 7.5**

Codi postal: **07122**
País de contacte: **Espanya**
Ciutat de contacte: **Palma de Mallorca**
Telèfon fix: **971173498 - 3498**
Fax: **971173426**
Correu electrònic: **david.quinonero@uib.es**

Situació professional actual, només si treballa (no situació d'atur)

Entitat ocupadora: Universidad de las Islas Baleares
Departament: Facultat de Ciències, Departament de Química
Categoria professional: Professor titular d'universitat
Data d'inici: 05/06/2018
Modalitat del contracte: Funcionari/a **Tipus de dedicació:** Temps complet
Primària (Codi UNESCO): 230600 - Química orgànica
Funcions desenvolupades: OMPLIU LA DEDICACIÓ PROFESSIONAL A L'APARTAT DE TEXTOS DEL CURRÍCULUM

Càrrecs i activitats ocupats desenvolupats amb anterioritat

	Entitat ocupadora	Categoria professional	Data d'inici
1	Universidad de las Islas Baleares	Profesor titular de universidad	05/06/2018
2	Universidad de las Islas Baleares	Profesor contratado doctor	01/10/2017
3	Universidad de las Islas Baleares	Profesor contratado doctor interino	01/12/2016
4	Universidad de las Islas Baleares	Contratado 'Ramón y Cajal'	01/12/2009
5	Universidad de las Islas Baleares	Contratado 'Ramón y Cajal'	01/12/2009
6	Universidad de las Islas Baleares	Contrato posdoctoral	01/06/2009
7	Universidad de las Islas Baleares	Investigador contratado doctor	15/12/2007
8	Universidad de las Islas Baleares	Contratado 'Juan de la Cierva'	15/12/2004
9	Emory University	Becario Postdoctoral MEC	01/07/2002
10	Universidad de las Islas Baleares	Becario Predoctoral UIB	01/01/1998

- 1** **Entitat ocupadora:** Universidad de las Islas Baleares
Categoría profesional: Profesor titular de universidad
Data d'inici: 05/06/2018
- 2** **Entitat ocupadora:** Universidad de las Islas Baleares
Categoría profesional: Profesor contratado doctor
Data d'inici: 01/10/2017 **Durada:** 8 meses - 4 dies
- 3** **Entitat ocupadora:** Universidad de las Islas Baleares
Categoría profesional: Profesor contratado doctor interino
Data d'inici: 01/12/2016 **Durada:** 10 meses
- 4** **Entitat ocupadora:** Universidad de las Islas Baleares
Categoría profesional: Contratado 'Ramón y Cajal'
Data d'inici: 01/12/2009 **Durada:** 7 anys
- 5** **Entitat ocupadora:** Universidad de las Islas Baleares
Categoría profesional: Contratado 'Ramón y Cajal'
Data d'inici: 01/12/2009 **Durada:** 7 anys
- 6** **Entitat ocupadora:** Universidad de las Islas Baleares
Categoría profesional: Contrato posdoctoral
Data d'inici: 01/06/2009 **Durada:** 6 meses
- 7** **Entitat ocupadora:** Universidad de las Islas Baleares
Categoría profesional: Investigador contratado doctor
Data d'inici: 15/12/2007 **Durada:** 1 any - 5 meses - 17 dies
- 8** **Entitat ocupadora:** Universidad de las Islas Baleares
Categoría profesional: Contratado 'Juan de la Cierva'
Data d'inici: 15/12/2004 **Durada:** 3 anys - 1 dia
- 9** **Entitat ocupadora:** Emory University
Categoría profesional: Becario Postdoctoral MEC
Data d'inici: 01/07/2002 **Durada:** 2 anys
- 10** **Entitat ocupadora:** Universidad de las Islas Baleares
Categoría profesional: Becario Predoctoral UIB
Data d'inici: 01/01/1998 **Durada:** 4 anys



Formació acadèmica rebuda

Titulació universitària

Estudis de primer i segon cicle i antics cicles (Llicenciats, Diplomats, Enginyers Superiors, Enginyers Tècnics, Arquitectes)

Titulació universitària: Diplomatura / Llicenciatura / Grau

Nom del títol: Llicenciat en Ciències Químiques

Entitat de la titulació: Universidad de las Islas Baleares

Data de la titulació: 28/08/1997

Doctorats

Doctorat: Doctor en Ciències Químiques

Entitat de la titulació: Universidad de las Islas Baleares

Tipus d'entitat: Universitat

Data de la titulació: 21/12/2001

Títol de la tesi: Estudio teórico del reconocimiento molecular de cationes amonio mediante receptores basados en unidades de escuaramida

Director/a de la tesi: Pedro María Deyà Serra, Antonio Frontera Beccaria

Qualificació obtinguda: Apte cum laude

Experiència docent

Direcció de tesis doctorals o projectes de fi de carrera

- 1 Títol del treball:** On the importance of σ - π -hole interactions in chemistry and biochemistry

Tipus de projecte: Tesi doctoral

Universitat de l'entitat de realització: Universidad de las Islas Baleares

Ciutat de l'entitat de realització: Espanya

Alumne: Antonio Bauzá Riera

Qualificació obtinguda: Excel·lent cum laude

Data de lectura: 2017
- 2 Títol del treball:** Estudio experimental y teórico de la síntesis de urazourazoles como nuevas unidades de reconocimiento molecular de aniones.

Tipus de projecte: Tesi de Màster

Universitat de l'entitat de realització: Universidad de las Islas Baleares

Ciutat de l'entitat de realització: Espanya

Alumne: José Luis Esquivel Hernández

Qualificació obtinguda: Notable

Data de lectura: 2015

**3 Títol del treball:** Estudio de interacciones no covalentes: Anión-pi y enlace de halógeno**Tipus de projecte:** Tesi de Màster**Universitat de l'entitat de realització:** Universidad de las Islas Baleares**Ciutat de l'entitat de realització:** Espanya**Alumne:** Antonio Bauzá Riera**Qualificació obtinguda:** Matrícula d'Honor**Data de lectura:** 2012**Participació en projectes d'innovació docent****Títol del projecte:** La carpeta d'aprenentatge com eina per a l'avaluació del projecte final de màster: proposta d'implantació al nou programa de Màster en Ciència i Tecnologia Química**Tipus de participació:** Miembro de equipo**Tipus de durada de la relació laboral:** De durada indeterminada o indefinida**Nom de l'investigador principal (IP):** Miquel Barceló Oliver**Nombre de participants:** 5**Import concedit:** 1.000 €**Entitat de finançament:** Institut de Ciències de l'Educació (ICE) - Universitat de les Illes Balears**Tipus d'entitat:** Altres organismes**Entitats participants:**

Universidad de las Islas Baleares

Tipus d'entitat: Universitat

Universidad de las Islas Baleares

Tipus d'entitat: Universitat**Tipus de convocatòria:** Competitiu**Data d'inici-fi:** 16/07/2012 - 13/09/2013**Durada:** 1 any - 1 mes - 29 dies**Experiència científica i tecnològica****Activitat científica o tecnològica****Participació en projectes d'R+D+I finançats en convocatòries competitives d'Administracions d'entitats públiques o privades****1 Denominació del projecte:** ESTALQUIM - ILLES BALEARS (Estimulación Talento Químico)**Entitat de realització:** Universidad de las Islas Baleares**Tipus d'entitat:** Universitat**Ciutat de l'entitat de realització:** Espanya**Nom dels investigadors principals (IP, Co-IP...):** Montserrat Rodriguez Delgado**Nombre d'investigadors:** 7**Entitats de finançament:**

Fundación Española para la Ciencia y la Tecnología (FECYT)

Tipus d'entitat: Fundacions**Ciutat de l'entitat de finançament:** Espanya**Codi segons l'entitat de finançament:** FCT-20-15511**Data d'inici-fi:** 01/09/2021 - 30/06/2022**Durada:** 10 mesos**Entitats participants:** Universitat de les Illes Balears



Quantia total: 5.000 €

2 Denominació del projecte: Aproximaciones supramoleculares para el desarrollo de materiales funcionales con aplicaciones biomédicas

Entitat de realització: Universidad de las Islas Baleares

Tipus d'entitat: Universitat

Ciutat de l'entitat de realització: Espanya

Nom dels investigadors principals (IP, Co-IP...): Antonio Frontera Beccaria; María del Carmen Rotger Pons

Nombre d'investigadors: 15

Entitats de finançament:

Ministerio de Economía, Industria y Competitividad

Tipus d'entitat: Ministeris

Ciutat de l'entitat de finançament: Espanya

Codi segons l'entitat de finançament: CTQ2017-85821-R

Data d'inici-fi: 01/01/2018 - 30/09/2021

Durada: 3 anys - 9 mesos

Entitats participants: Universitat de les Illes Balears

Quantia total: 105.270 €

3 Denominació del projecte: Estudios de química supramolecular fundamental y aplicada con orientación biomédica. Acrónimo: SUPRABIO2014

Entitat de realització: Universidad de las Islas Baleares

Tipus d'entitat: Universitat

Ciutat de l'entitat de realització: Espanya

Nom dels investigadors principals (IP, Co-IP...): Antonio Costa Torres; Antonio Frontera Beccaria

Nombre d'investigadors: 11

Entitats de finançament:

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO)

Tipus d'entitat: Ministeris

Ciutat de l'entitat de finançament: Espanya

Codi segons l'entitat de finançament: CTQ2014-57393-C2-1-P

Data d'inici-fi: 01/01/2015 - 30/06/2018

Durada: 3 anys - 6 mesos

Entitats participants: Universitat de les Illes Balears

Quantia total: 108.900 €

4 Denominació del projecte: Supramolecular Chemistry Applied to the Design, Synthesis and Evaluation of Bioactive Compounds of Antiinflammatory, Antitumour or Antiparasitic Action

Entitat de realització: Universidad de las Islas Baleares

Tipus d'entitat: Universitat

Ciutat de l'entitat de realització: Espanya

Nom dels investigadors principals (IP, Co-IP...): Antonio Costa Torres

Nombre d'investigadors: 2

Entitats de finançament:

Ministerio de Ciencia e Innovación

Tipus d'entitat: Ministeris

Ciutat de l'entitat de finançament: Espanya

Codi segons l'entitat de finançament: CSD2010 00065

Data d'inici-fi: 01/01/2011 - 26/12/2016

Durada: 5 anys - 11 mesos - 26 dies

Entitats participants: Universitat de les Illes Balears

Quantia total: 434.811,2 €



5 Denominació del projecte: Estudios relativos a la química supramolecular de sistemas aromáticos y de base esquamida: aplicaciones biológicas y tecnológicas

Entitat de realització: Universidad de las Islas Baleares

Tipus d'entitat: Universitat

Ciutat de l'entitat de realització: Espanya

Nom dels investigadors principals (IP, Co-IP...): Antonio Costa Torres

Nombre d'investigadors: 12

Entitats de finançament:

Ministerio de Ciencia e Innovación

Tipus d'entitat: Ministeris

Ciutat de l'entitat de finançament: Espanya

Codi segons l'entitat de finançament: CTQ2011 27152

Data d'inici-fi: 01/01/2012 - 31/12/2014

Durada: 3 anys

Entitats participants: Universitat de les Illes Balears

Quantia total: 199.650 €

6 Denominació del projecte: Estudios relativos a estructuras supramoleculares: desde la teoría y la modelización a la detección y evaluación de la actividad biológica

Entitat de realització: Universidad de las Islas Baleares

Tipus d'entitat: Universitat

Ciutat de l'entitat de realització: Espanya

Nom dels investigadors principals (IP, Co-IP...): Antonio Costa Torres

Nombre d'investigadors: 9

Entitats de finançament:

Ministerio de Educación y Ciencia

Tipus d'entitat: Ministeris

Ciutat de l'entitat de finançament: Espanya

Codi segons l'entitat de finançament: CTQ2008 00841

Data d'inici-fi: 01/01/2009 - 31/12/2011

Durada: 3 anys

Entitats participants: Universitat de les Illes Balears

Quantia total: 192.269 €

7 Denominació del projecte: Estudio experimental y teórico de unidades básicas viables para la construcción de receptores de aniones tóxicos frecuentemente presentes en el medio ambiente.

Entitat de realització: Universidad de las Islas Baleares

Tipus d'entitat: Universitat

Ciutat de l'entitat de realització: Espanya

Nom dels investigadors principals (IP, Co-IP...): David Quiñonero Santiago

Nombre d'investigadors: 10

Entitats de finançament:

Direcció General de Recerca, Desenvolupament Tecnològic i Innovació. Conselleria d'Economia, Hisenda i Innovació del Govern Balear

Tipus d'entitat: Comunitats Autònomes

Ciutat de l'entitat de finançament: Espanya

Codi segons l'entitat de finançament: PROGECIB-33A

Data d'inici-fi: 2006 - 2008

Durada: 2 anys - 1 dia

Entitats participants: Universitat de les Illes Balears

Quantia total: 35.000 €

8 Denominació del projecte: Diseño, síntesis y evaluación de estructuras supramoleculares funcionales: sensores, receptores y dispositivos moleculares

Entitat de realització: Universidad de las Islas Baleares

Tipus d'entitat: Universitat



Ciutat de l'entitat de realització: Espanya

Nom dels investigadors principals (IP, Co-IP...): Pere Maria Deya Serra

Nombre d'investigadors: 11

Entitats de finançament:

Dirección General de Investigación Científica y
Técnica

Tipus d'entitat: Ministeris

Ciutat de l'entitat de finançament: Madrid, Espanya

Codi segons l'entitat de finançament: CTQ2005-08989-C02-01/BQU

Data d'inici-fi: 2005 - 2008

Durada: 3 anys - 1 dia

Entitats participants: Universitat de les Illes Balears

Quantia total: 178.500 €

9 Denominació del projecte: Principles of Selective O₂-Based Oxidation by Optimal(Binuclear) Catalytic Sites.

Entitat de realització: Universidad de las Islas
Balears

Tipus d'entitat: Universitat

Ciutat de l'entitat de realització: Espanya

Nom dels investigadors principals (IP, Co-IP...): Djamaladdin G. Musaev

Entitats de finançament:

DOE - United States, Department of Energy

Tipus d'entitat: Altres organismes

Ciutat de l'entitat de finançament: Desconegut

Codi segons l'entitat de finançament: DE-FG02-03ER15461

Data d'inici-fi: 2003 - 2006

Durada: 3 anys - 1 dia

Entitats participants: Universitat de les Illes Balears

Quantia total: 903.943 €

10 Denominació del projecte: Estudios relativos a especies supramoleculares de interés como materiales nanoestructurados y quimiosensores

Entitat de realització: Universidad de las Islas
Balears

Tipus d'entitat: Universitat

Ciutat de l'entitat de realització: Espanya

Nom dels investigadors principals (IP, Co-IP...): Antonio Costa Torres

Nombre d'investigadors: 9

Entitats de finançament:

Dirección General de Investigación Científica y
Técnica

Tipus d'entitat: Ministeris

Ciutat de l'entitat de finançament: Madrid, Espanya

Codi segons l'entitat de finançament: BQU2002-04651

Data d'inici-fi: 2002 - 2005

Durada: 3 anys - 1 dia

Entitats participants: Universitat de les Illes Balears

Quantia total: 156.400 €

11 Denominació del projecte: Theoretical Studies of Structures and Reactions of Transition Metal Atoms, Ions, Complexes and Cluster Complexes.

Entitat de realització: Universidad de las Islas
Balears

Tipus d'entitat: Universitat

Ciutat de l'entitat de realització: Espanya

Nom dels investigadors principals (IP, Co-IP...): Keiji Morokuma

Entitats de finançament:

NSF

Tipus d'entitat: Altres organismes



Ciutat de l'entitat de finançament: Desconegut

Codi segons l'entitat de finançament: CHE- 0209660

Data d'inici-fi: 2002 - 2005

Durada: 3 anys - 1 dia

Entitats participants: Universitat de les Illes Balears

Quantia total: 345.000 €

- 12 Denominació del projecte:** Estudios relativos a especies supramoleculares de interés como materiales nanoestructurados y quimiosensores.

Entitat de realització: Universidad de las Islas Baleares

Tipus d'entitat: Universitat

Ciutat de l'entitat de realització: Espanya

Nom dels investigadors principals (IP, Co-IP...): Antoni Costa Torres

Entitats de finançament:

Conselleria d'Innovació i Tecnologia

Tipus d'entitat: Altres organismes

Ciutat de l'entitat de finançament: Desconegut

Codi segons l'entitat de finançament: PRDIB-2002GC1-05

Data d'inici-fi: 2002 - 2004

Durada: 2 anys - 1 dia

Entitats participants: Universitat de les Illes Balears

Quantia total: 36.000 €

- 13 Denominació del projecte:** Estudios en Química Supramolecular: Reconocimiento Molecular, Quimiosensores y autoensamblaje

Entitat de realització: Universidad de las Islas Baleares

Tipus d'entitat: Universitat

Ciutat de l'entitat de realització: Espanya

Nom dels investigadors principals (IP, Co-IP...): Pau Ballester Balaguer

Nombre d'investigadors: 10

Entitats de finançament:

Dirección General de Enseñanza Superior

Tipus d'entitat: Altres organismes

Ciutat de l'entitat de finançament: Desconegut

Codi segons l'entitat de finançament: PB98-0129

Data d'inici-fi: 1999 - 2002

Durada: 3 anys - 1 dia

Entitats participants: Universitat de les Illes Balears

Quantia total: 66.111,33 €

- 14 Denominació del projecte:** Reconocimiento molecular mediante receptores tripodales, síntesis, caracterización estructural y aplicaciones.

Entitat de realització: Universidad de las Islas Baleares

Tipus d'entitat: Universitat

Ciutat de l'entitat de realització: Espanya

Nom dels investigadors principals (IP, Co-IP...): Antoni Costa Torres

Nombre d'investigadors: 6

Entitats de finançament:

Dirección General de Investigación Científica y Técnica

Tipus d'entitat: Ministeris

Ciutat de l'entitat de finançament: Madrid, Espanya

Codi segons l'entitat de finançament: PB95-0341

Data d'inici-fi: 1996 - 1999

Durada: 3 anys - 1 dia

Entitats participants: Universitat de les Illes Balears

Quantia total: 36.060 €



Activitats científiques i tecnològiques

Producció científica

Publicacions, documents científics i tècnics

- 1** Quiñonero D.; Alkorta, I.; Elguero, J. Metastable Dianions and Dications. 910825 - Chemphyschem. 21 - 14, pp. 1597 - 1607. (Alemanya): 2020. ISSN 1439-4235
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Font d'impacte: ISI
Revista dins del 25%: No
Índex d'impacte: 3.102
Nombre de revistes a la categoria: 162
Posició de publicació: 89
Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Font d'impacte: ISI
Revista dins del 25%: No
Índex d'impacte: 3.102
Nombre de revistes a la categoria: 37
Posició de publicació: 11
- 2** Jayasinghe-Arachchige, V. M.; Hu, Q.; Sharma, G.; Paul, T. J.; Lundberg, M.; Quinonero, D.; Parac-Vogt, T. N.; Prabhakar, R. Hydrolysis of chemically distinct sites of human serum albumin by polyoxometalate: A hybrid QM/MM (ONIOM) study. 900660 - Journal of Computational Chemistry. 50, pp. 51 - 61. (Estats Units d'Amèrica): 2019. ISSN 0192-8651
DOI: <https://doi.org/10.1002/jcc.25528>
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Font d'impacte: ISI
Revista dins del 25%: No
Índex d'impacte: 2.976
Nombre de revistes a la categoria: 177
Posició de publicació: 78
- 3** Quiñonero, D.; Frontera, A. Hydrogen Bond versus Halogen Bond in HXOn (X = F, Cl, Br, and I) Complexes with Lewis Bases. 002649 - Inorganics. 7, pp. 9. MDPI, 2019. ISSN 2304-6740
DOI: <https://doi.org/10.3390/inorganics7010009>
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
- 4** Iribarren, I.; Montero-Campillo, M.M.; Alkorta, I.; Elguero, J.; Quiñonero D. Cations brought together by hydrogen bonds: the protonated pyridine-boronic acid dimer explained. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 21 - 10, pp. 5796 - 5802. (Regne Unit): 2019. ISSN 1463-9076
DOI: <https://doi.org/10.1039/C8CP07542E>
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Font d'impacte: ISI
Revista dins del 25%: No
Índex d'impacte: 3.43
Nombre de revistes a la categoria: 159
Posició de publicació: 66
Font d'impacte: ISI



Índex d'impacte: 3.43
Posició de publicació: 8

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dins del 25%: Sí
Nombre de revistes a la categoria: 37

- 5** Franconetti, A.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Resnati, G. Unexpected chalcogen bonds in tetravalent sulfur compounds. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 21 - 21, pp. 11313 - 11319. (Regne Unit): 2019. ISSN 1463-9076

Tipus de producció: Artículo científico
Posició de signatura: 0
Font d'impacte: ISI
Índex d'impacte: 3.43
Posició de publicació: 66

Tipus de suport: Revista
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dins del 25%: No
Nombre de revistes a la categoria: 159

Font d'impacte: ISI

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dins del 25%: Sí
Nombre de revistes a la categoria: 37

Índex d'impacte: 3.43
Posició de publicació: 8

- 6** Thomas J. Paul; Tatjana N. Parac-Vogt; David Quiñonero; Rajeev Prabhakar. Investigating Polyoxometalate-Protein Interactions at Chemically Distinct Binding Sites. 909613 - Journal of Physical Chemistry B. 122 - 29, pp. 7219 - 7232. (Estats Units d'Amèrica): 2018. ISSN 1520-6106

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b02931>

Tipus de producció: Artículo científico
Posició de signatura: 0
Font d'impacte: ISI
Índex d'impacte: 2.923
Posició de publicació: 69

Tipus de suport: Revista
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dins del 25%: No
Nombre de revistes a la categoria: 148

- 7** Maria Nieves Piña; Paulina Rodríguez; Susana Gutierrez; David Quiñonero; Jeroni Morey; Antonio Frontera. Adsorption and quantification of VOCs using Hybrid Magnetic Nanoparticles. 908895 - Chemistry-A European Journal. 24 - 49, pp. 12820 - 12826. (Alemanya): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2018. Disponible en Internet en: <<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/chem.201802945>>. ISSN 0947-6539

DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201802945>

Tipus de producció: Artículo científico
Posició de signatura: 0
Nombre total d'autors: 6
Font d'impacte: ISI
Índex d'impacte: 5.16
Posició de publicació: 37

Tipus de suport: Revista
Categoria: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dins del 25%: Sí
Nombre de revistes a la categoria: 172

- 8** María de las Nieves Piña; Paulina Rodríguez; María Susana Gutiérrez; David Quiñonero; Jeroni Morey; Antonio Frontera. Adsorption and Quantification of Volatile Organic Compounds (VOCs) by using Hybrid Magnetic Nanoparticles. 908895 - Chemistry-A European Journal. 24 - 49, pp. 12820. (Alemanya): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2018. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1002/chem.201884965>>. ISSN 0947-6539

DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201884965>

Tipus de producció: Artículo científico
Posició de signatura: 0
Nombre total d'autors: 6
Font d'impacte: ISI

Tipus de suport: Revista
Categoria: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

**Índex d'impacte:** 5.16**Posició de publicació:** 37**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 172

- 9** Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Frontera, A. Substituent Effects in Multivalent Halogen Bonding Complexes: A Combined Theoretical and Crystallographic Study. 910462 - *Molecules*. 23, pp. 18. (Suïssa): MDPI, 2018. ISSN 1420-3049

DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules23010018>**Tipus de producció:** Artículo científico**Tipus de suport:** Revista**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 7**Font d'impacte:** ISI**Categoria:** BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY**Índex d'impacte:** 3.06**Revista dins del 25%:** No**Posició de publicació:** 136**Nombre de revistes a la categoria:** 298**Font d'impacte:** ISI**Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índex d'impacte:** 3.06**Revista dins del 25%:** No**Posició de publicació:** 68**Nombre de revistes a la categoria:** 172

- 10** Quiñonero, D. Sigma-Hole Carbon-Bonding Interactions in Carbon-Carbon Double Bonds: An Unnoticed Contact. 910477 - *Physical Chemistry Chemical Physics*. 19, pp. 15530 - 15540. (Regne Unit): 2017. ISSN 1463-9076

Tipus de producció: Artículo científico**Tipus de suport:** Revista**Posició de signatura:** 1**Nombre total d'autors:** 1**Font d'impacte:** ISI**Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Índex d'impacte:** 3.906**Revista dins del 25%:** No**Posició de publicació:** 46**Nombre de revistes a la categoria:** 147**Font d'impacte:** ISI**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Índex d'impacte:** 3.906**Revista dins del 25%:** Sí**Posició de publicació:** 9**Nombre de revistes a la categoria:** 37

- 11** Chalanchi, S. M.; Alkorta, I.; Elguero, J.; Quiñonero, D. Hydrogen Bond versus Halogen Bond in Cation-Cation Complexes: Effect of the Solvent. 910825 - *Chemphyschem*. 18 - 23, pp. 3462 - 3468. (Alemanya): 2017. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.201700819>**Tipus de producció:** Artículo científico**Tipus de suport:** Revista**Posició de signatura:** 0**Font d'impacte:** ISI**Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Índex d'impacte:** 2.947**Revista dins del 25%:** No**Posició de publicació:** 62**Nombre de revistes a la categoria:** 147**Font d'impacte:** ISI**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Índex d'impacte:** 2.947**Revista dins del 25%:** No**Posició de publicació:** 11**Nombre de revistes a la categoria:** 37

- 12** Quiñonero, D.; Bauza, A.; Sánchez, G.; Trujillo, C.; Alkorta, I.; Elguero, J. Weak interactions within nitril halide heterodimers. 900672 - *New Journal of Chemistry*. 40, pp. 9060 - 9072. (França): 2016. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/c6nj01334a>

Tipus de producció: Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 3.269**Posició de publicació:** 52**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dins del 25%:** No**Nombre de revistes a la categoria:** 166

- 13** Quiñonero, D.; Alkorta, I.; Elguero, J. Cation-cation and anion-anion complexes stabilized by halogen bonds. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 18 - 40, pp. 27939 - 27950. (Regne Unit): 2016. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/C6CP03662G>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 4.123**Posició de publicació:** 38**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dins del 25%:** No**Nombre de revistes a la categoria:** 146**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 4.123**Posició de publicació:** 6**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 36

- 14** Lucas, Xavier.; Bauzá Riera, Antonio; Frontera Beccaria, Antonio; Quiñonero Santiago, David. A thorough anion- π interaction study in biomolecules: on the importance of cooperativity effects. 915573 - Chemical Science. 2016 - 7, pp. 1038 - 1050. (Regne Unit): Royal Society of Chemistry, 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/C5SC01386K>>. ISSN 2041-6520

DOI: <https://doi.org/10.1039/C5SC01386K>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/1766>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 4**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 9.144**Posició de publicació:** 14**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 163

- 15** Quiñonero, D. Anion recognition by pyrylium cations and thio-, seleno- and telluro- analogues: a combined theoretical and cambridge structural database study. 910462 - Molecules. 20, pp. 11632 - 11659. (Suïssa): MDPI, 2015. Disponible en Internet en: <<http://www.mdpi.com/1420-3049/20/7/11632>>. ISSN 1420-3049

DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules200711632>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 1**Nombre total d'autors:** 1**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.416**Posició de publicació:** 24**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, ORGANIC**Revista dins del 25%:** No**Nombre de revistes a la categoria:** 59

- 16** Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; P. Ballester. Reconciling Experiment and Theory in the Use of Aryl-Extended Calix[4]pyrrole Receptors for the Experimental Quantification of Chloride π Interactions in Solution. 916889 - International Journal Of Molecular Sciences. 16, pp. 8934 - 8948. (Suïssa): MDPI AG, Basel, Switzerland, 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.3390/ijms16048934>>. ISSN 1661-6596

DOI: <https://doi.org/10.3390/ijms16048934>

**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/1257>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Tipus de suport:** Revista

- 17** Bauza, A.; Deyà, P. M.; Frontera, A.; Quiñonero, D. Substituent Effects in Cation/ π Interactions Revisited: A General Approach from Intrinsic Properties of the Arenes. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 16 - 4, pp. 1322 - 1326. (Regne Unit): 2014. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/C3CP54147A>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147519>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 4.493**Posició de publicació:** 32**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 139**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 4.493**Posició de publicació:** 6**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 34

- 18** Morey, J.; López, K.A.; Piña, M.N.; Quiñonero, D.; Ballester, P. Highly efficient coordination of Hg^{2+} and Pb^{2+} metals in water with squaramide-coated Fe_3O_4 nanoparticles. 917754 - Journal Of Materials Chemistry a. 2, pp. 8796 - 8803. (Regne Unit): 2014. ISSN 2050-7488

DOI: <https://doi.org/10.1039/C4TA00990H>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 5**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 7.443**Posició de publicació:** 18**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 139**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 7.443**Posició de publicació:** 5**Categoria:** ENERGY & FUELS**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 89**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 7.443**Posició de publicació:** 20**Categoria:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 260

- 19** Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M.; Frontera, A. Long range effects in anion- π interactions: their crucial role in the inhibition mechanism of Mycobacterium tuberculosis malate synthase. 908895 - Chemistry-A European Journal. 20, pp. 6985 - 6990. (Alemanya): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2014. ISSN 0947-6539

DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201304995>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147622>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 4**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 5.731**Posició de publicació:** 22**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 157

- 20** Adriaenssens, L.V.; Gil-Ramírez, G.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Escudero-Adán, E.C.; Ballester, P. Thermodynamic Characterization of Halide- π Interactions in Solution using 'Two-wall' Aryl extended Calix[4]pyrroles as Model System. 900665 - Journal of the American Chemical Society. 136 - 8, pp. 3208 - 3218. (Estat Units d'Amèrica): American Chemical Society, 2014. ISSN 0002-7863

DOI: <https://doi.org/10.1021/ja412098v>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147814>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 12.113

Posició de publicació: 10

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 157

- 21** Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M.; Frontera, A. Quadrupole Moment versus Molecular Electrostatic Potential: strange behaviour of ethynyl-substituted benzenes. 903311 - Chemical Physics Letters. 567, pp. 60 - 65. (Holanda): 2013. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2013.02.064>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147654>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 1.991

Posició de publicació: 77

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 136

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 1.991

Posició de publicació: 17

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 33

- 22** Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M.; Frontera, A. Is the use of diffuse functions essential for the properly description of noncovalent interactions involving anions?. 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 117 - 12, pp. 2651 - 2655. (Estat Units d'Amèrica): 2013. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp312755z>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148325>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 4

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.775

Posició de publicació: 50

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 136

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.775

Posició de publicació: 11

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 33

- 23** Estarellas, C.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M.; Frontera, A. Anion- π Interactions Involving $[MX_n]^-$ Anions: A Comprehensive Theoretical Study. 910825 - Chemphyschem. 14 - 1, pp. 145 - 154. (Alemanya): 2013. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.201200654>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152221>

Tipus de producció: Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 4**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 3.36**Posició de publicació:** 40**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 3.36**Posició de publicació:** 7**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dins del 25%:** No**Nombre de revistes a la categoria:** 136**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 33

- 24** Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deya, P.M.; Frontera, A. Anion- π interactions in [S₄N₃]⁺ rings: A Tribute to J. Derek Woollins. 900672 - New Journal of Chemistry. 37, pp. 2636 - 2641. (França): 2013. ISSN 1144-0546

Tipus de producció: Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 3.159**Posició de publicació:** 40**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dins del 25%:** No**Nombre de revistes a la categoria:** 148

- 25** Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deya, P.M.; Frontera, A. Halogen bonding versus chalcogen and pnictogen bonding: a combined Cambridge structural database and theoretical study. 912697 - Crystengcomm. 15, pp. 3137 - 3144. (Regne Unit): 2013. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/c2ce26741a>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148005>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 4**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 3.858**Posició de publicació:** 33**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 148**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 3.858**Posició de publicació:** 4**Categoria:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 23

- 26** Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deya, P.M.; Frontera, A. On the importance of anion- π interactions in the mechanism of sulfide:quinone oxidoreductase. 914021 - Chemistry-An Asian Journal. 8, pp. 2708 - 2713. (Alemanya): 2013. ISSN 1861-4728

DOI: <https://doi.org/10.1002/asia.201300786>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 4**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 3.935**Posició de publicació:** 32**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 148

- 27** Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M.; Frontera, A. Theoretical ab initio study of anion- π interactions in inorganic rings. 903311 - Chemical Physics Letters. 530, pp. 145 - 150. (Holanda): 2012. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2012.01.079>



Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148659>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 4

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.145

Posició de publicació: 67

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.145

Posició de publicació: 13

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 135

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 34

- 28** Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M.; Frontera, A. Estimating ring strain energies in small carbocycles by means of the Bader's theory of 'atoms-in-molecules'. 903311 - Chemical Physics Letters. 536, pp. 165 - 169. (Holanda): 2012. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2012.04.007>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148662>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 4

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.145

Posició de publicació: 67

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.145

Posició de publicació: 13

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 135

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 34

- 29** Quinonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M. Feasibility of Single-Walled Carbon Nanotubes as Materials for CO₂ Adsorption: A DFT Study. 914198 - Journal Of Physical Chemistry C. 116 - 39, pp. 21083 - 21092. (Estats Units d'Amèrica): 2012. ISSN 1932-7447

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp306586f>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147900>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 4.814

Posició de publicació: 28

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 4.814

Posició de publicació: 27

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 4.814

Posició de publicació: 19

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 135

Categoria: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 241

Categoria: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 69

- 30** Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M.; Frontera, A. Tuning of the anion pi interaction. 909714 - Theoretical Chemistry Accounts. 131, pp. 1219 - 1231. (Alemania): 2012. ISSN 1432-881X
DOI: <https://doi.org/10.1007/s00214-1219-6>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148291>
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Nombre total d'autors: 4
Revista dins del 25%: No
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 135
Índex d'impacte: 2.233
Posició de publicació: 63
- 31** Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M.; Frontera, A. Pnictogen-pi complexes: theoretical study and biological implications. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 14 - 40, pp. 14061 - 14066. (Regne Unit): 2012. ISSN 1463-9076
DOI: <https://doi.org/10.1039/c2cp42672b>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147982>
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Nombre total d'autors: 4
Revista dins del 25%: Sí
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 135
Índex d'impacte: 3.829
Posició de publicació: 32
Font d'impacte: ISI
Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Índex d'impacte: 3.829
Revista dins del 25%: Sí
Posició de publicació: 6
Nombre de revistes a la categoria: 34
- 32** Bauza, A.; Quinonero, D.; Deya, P.M.; Frontera, A. Theoretical ab initio study of lone pair and anion-pi interactions in fluorinated tropolones. 917110 - Computational And Theoretical Chemistry. 998, pp. 20 - 25. (Holanda): 2012. ISSN 2210-271X
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2012.05.011>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147989>
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Font d'impacte: ISI
Revista dins del 25%: No
Índex d'impacte: 1.139
Nombre de revistes a la categoria: 135
Posició de publicació: 105
- 33** Quinonero, D.; Frontera, A.; Deya, P.M. Interplay between ion-pi and Ar/pi Van der Waals interactions. 917110 - Computational And Theoretical Chemistry. 998, pp. 51 - 56. (Holanda): 2012. ISSN 2210-271X
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147923>
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Font d'impacte: ISI
Revista dins del 25%: No
Índex d'impacte: 1.139
Nombre de revistes a la categoria: 135
Posició de publicació: 105

- 34** García-Valverde, M.; Alfonso, I.; Quiñonero, D.; Quesada, R. Conformational analysis of a model synthetic prodiginine. 900789 - Journal of Organic Chemistry. 77, pp. 6538 - 6544. (Estats Units d'Amèrica): American Chemical Society, 2012. ISSN 0022-3263
Tipus de producció: Artículo científico **Tipus de suport:** Revista
Posició de signatura: 0
Nombre total d'autors: 4
Font d'impacte: ISI **Categoria:** CHEMISTRY, ORGANIC
Índex d'impacte: 4.564 **Revista dins del 25%:** Sí
Posició de publicació: 10 **Nombre de revistes a la categoria:** 57
- 35** Espino, G.; Jalón, F.A.; Manzano, B.R.; Pérez-Manrique, M.; Mereiter, K.; Quiñonero, D. Synthesis and structure of cis-[RuCl(bpzm)(k1-P-dpim)(k2-P,N-dpim)]Cl·(CHCl₃)₅. Stability of [Cl(HCCl₃)_n]₂ aggregates. 909109 - Supramolecular Chemistry. 24, pp. 787 - 798. (Regne Unit): 2012. ISSN 1061-0278
Tipus de producció: Artículo científico **Tipus de suport:** Revista
Posició de signatura: 0
Nombre total d'autors: 7
Font d'impacte: ISI **Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índex d'impacte: 1.546 **Revista dins del 25%:** No
Posició de publicació: 68 **Nombre de revistes a la categoria:** 152
- 36** Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Unexpected nonadditivity effects in anion- π complexes. 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 115 - 16, pp. 7849 - 7857. (Estats Units d'Amèrica): 2011. ISSN 1089-5639
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp2038416>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147920>
Tipus de producció: Artículo científico **Tipus de suport:** Revista
Posició de signatura: 0
Nombre total d'autors: 4
Font d'impacte: ISI **Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL
Índex d'impacte: 2.95 **Revista dins del 25%:** No
Posició de publicació: 46 **Nombre de revistes a la categoria:** 129
Font d'impacte: ISI **Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Índex d'impacte: 2.95 **Revista dins del 25%:** No
Posició de publicació: 9 **Nombre de revistes a la categoria:** 33
- 37** Lucas, X.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M. The Role of the Ethynyl Substituent on the π - π Stacking Affinity of Benzene: A Theoretical Study. 910825 - Chemphyschem. 12 - 2, pp. 283 - 288. (Alemanya): 2011. ISSN 1439-4235
DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.201000891>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152201>
Tipus de producció: Artículo científico **Tipus de suport:** Revista
Posició de signatura: 0
Nombre total d'autors: 4
Font d'impacte: ISI **Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL
Índex d'impacte: 3.41 **Revista dins del 25%:** No
Posició de publicació: 38 **Nombre de revistes a la categoria:** 129
Font d'impacte: ISI **Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL



Índex d'impacte: 3.41
Posició de publicació: 6

Revista dins del 25%: Sí
Nombre de revistes a la categoria: 33

- 38** Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deya, P.M. Theoretical Study on Cooperativity Effects between Anion- π and Halogen-Bonding Interactions. 910825 - Chemphyschem. 12 - 15, pp. 2742 - 2750. (Alemanya): 2011. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.201100492>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152214>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 4

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 3.41

Posició de publicació: 38

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 3.41

Posició de publicació: 6

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 129

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 33

- 39** Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Radical cation (C($\cdot$ +) - π) and radical anion (A($\cdot$ -) - π) interactions with aromatic rings: energetic, orbitalic and spin density considerations. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 13 - 37, pp. 16698 - 16705. (Regne Unit): 2011. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/c1cp21685f>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147648>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 4

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 3.57

Posició de publicació: 34

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 3.57

Posició de publicació: 5

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 129

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 33

- 40** Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M. Substituent effects in halogen bonding complexes between aromatic donors and acceptors: a comprehensive ab initio study. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 13, pp. 20371 - 20379. (Regne Unit): 2011. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/C1CP22456E>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148324>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 4

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 3.57

Posició de publicació: 34

Font d'impacte: ISI

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 129

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL



Índex d'impacte: 3.57
Posició de publicació: 5

Revista dins del 25%: Sí
Nombre de revistes a la categoria: 33

- 41** Garau, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Russo, N.; Deya, P.M. RI-MP2 and MPWB1K Study of pi-Anion-pi' Complexes: MPWB1K Performance and Some Additivity Aspects. 913200 - Journal Of Chemical Theory And Computation. 50 - 2, pp. 415 - 418. (Estats Units d'Amèrica): 2011. ISSN 1549-9618

DOI: <https://doi.org/10.1021/ct200405w>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148010>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 5

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 5.22

Posició de publicació: 22

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 5.22

Posició de publicació: 2

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 129

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 33

- 42** Quiñonero, D.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Deyà, P.M. A methodological analysis for the assessment of noncovalent pi interactions. 903311 - Chemical Physics Letters. 508, pp. 144 - 148. (Holanda): 2011. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2011.04.004>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147613>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 4

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.34

Posició de publicació: 56

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.34

Posició de publicació: 12

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 129

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 33

- 43** Estarellas, C.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. On the directionality of anion-pi interactions. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 13, pp. 5696 - 5702. (Regne Unit): 2011. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/C0CP01894E>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147570>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 5

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 3.57

Posició de publicació: 34

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 3.57

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 129

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: Sí

Posició de publicació: 5**Nombre de revistes a la categoria:** 33

- 44** Quiñonero, D.; López, K.A.; Deyà, P.M.; Piña, M.N.; Morey, J. Synthetic Tripodal Squaramido-Based Receptors for the Complexation of Antineoplastic Folates in Water. 910608 - European Journal of Organic Chemistry. 2011 - 31, pp. 6187 - 6194. (Alemanya): 2011. ISSN 1434-193X

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejoc.201190088>**Tipus de producció:** Article científico**Tipus de suport:** Revista**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 5**Font d'impacte:** ISI**Categoria:** CHEMISTRY, ORGANIC**Índex d'impacte:** 3.33**Revista dins del 25%:** No**Posició de publicació:** 14**Nombre de revistes a la categoria:** 56

- 45** Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Can lone pair-pi and cation-pi interactions coexist? A theoretical study. 912887 - Central European Journal Of Chemistry. 9 - 1, pp. 25 - 34. (Polònia): De Gruyter Open Versita, 2011. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.2478/s11532-010-0127-7>>. ISSN 1895-1066

DOI: <https://doi.org/10.2478/s11532-010-0127-7>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/1492>**Tipus de producció:** Article científico**Tipus de suport:** Revista**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 4**Font d'impacte:** ISI**Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índex d'impacte:** 1.07**Revista dins del 25%:** No**Posició de publicació:** 90**Nombre de revistes a la categoria:** 151

- 46** Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Relevant anion-pi interactions in biological systems: the case of Urate Oxidase. 900624 - Angewandte Chemie-International Edition. 50 - 2, pp. 415 - 418. (Alemanya): 2011. ISSN 1433-7851

DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.201005635>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/152197>**Tipus de producció:** Article científico**Tipus de suport:** Revista**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 4**Font d'impacte:** ISI**Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índex d'impacte:** 13.46**Revista dins del 25%:** Sí**Posició de publicació:** 7**Nombre de revistes a la categoria:** 151

- 47** Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Anion-pi Interactions in flavoproteins. 914021 - Chemistry-An Asian Journal. 6 - 9, pp. 2316 - 2318. (Alemanya): 2011. ISSN 1861-4728

DOI: <https://doi.org/10.1002/asia.201100285>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/152217>**Tipus de producció:** Article científico**Tipus de suport:** Revista**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 4**Font d'impacte:** ISI**Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índex d'impacte:** 4.5**Revista dins del 25%:** Sí**Posició de publicació:** 27**Nombre de revistes a la categoria:** 151

- 48** Borja Dí az de Greñu; Paulina Iglesias Hern ández; Margarita Espona; David Quiñonero; Mark E. Light; Tom ás Torroba; Ricardo Pé rez-Tomá s; Roberto Quesada. Synthetic prodiginine Obatoclax (GX15-070) and related analogues: Anion binding, transmembrane transport, and cytotoxicity properties. 908895 - Chemistry-A European Journal. 17, pp. 14074 - 14083. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2011. ISSN 0947-6539

Tipus de producció: Artículo científico

Tipus de suport: Revista

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 8

Font d'impacte: ISI

Categoria: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índex d'impacte: 5.93

Revista dins del 25%: Sí

Posició de publicació: 20

Nombre de revistes a la categoria: 151

- 49** Govor, E.V.; Lysenko, A.B.; Quiñonero, D.; Rusanov, E.B.; Chernega, A.N.; Moellmer, J.; Staudt, R.; Krautscheid, H.; Frontera, A.; Domasevitch, K.V. Self-assembly hexanuclear metallacontainer hosting halogenated guest species and sustaining structure of 3D coordination framework. 909184 - Chemical Communications. 47, pp. 1764 - 1766. (Regne Unit): Royal Society of Chemistry, 2011. ISSN 1359-7345

DOI: <https://doi.org/10.1039/C0CC04433D>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147997>

Tipus de producció: Artículo científico

Tipus de suport: Revista

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 10

Font d'impacte: ISI

Categoria: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índex d'impacte: 6.17

Revista dins del 25%: Sí

Posició de publicació: 19

Nombre de revistes a la categoria: 151

- 50** Mandal, P.C.; Chakraborty, M.; Das, S.; Estarellas, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Kinetics and mechanism of the oxidation of hydroxylamine by a {Mn(3)O(4)}(4+) core in aqueous acidic media. 912705 - Dalton Transactions. 40 - 37, pp. 9571 - 9579. (Regne Unit): 2011. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/c0nj00715c>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152215>

Tipus de producció: Artículo científico

Tipus de suport: Revista

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 7

Font d'impacte: ISI

Categoria: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índex d'impacte: 3.84

Revista dins del 25%: Sí

Posició de publicació: 7

Nombre de revistes a la categoria: 44

- 51** Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Cation-pi and anion-pi interactions. 916969 - Wiley Interdisciplinary Reviews-Computational Molecular Science. 1, pp. 440 - 459. (Regne Unit): 2011. ISSN 1759-0876

DOI: <https://doi.org/10.1002/wcms.14>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147614>

Tipus de producció: Artículo científico

Tipus de suport: Revista

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 3

Font d'impacte:

Categoria: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índex d'impacte:

Revista dins del 25%: No

Font d'impacte:

Categoria: MATHEMATICAL & COMPUTATIONAL BIOLOGY

Índex d'impacte:

Revista dins del 25%: No



- 52** Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Theoretical ab initio study of substituted benzene trimer: Interplay between hydrogen bonding and $\pi\zeta\pi$ interactions. 917110 - Computational And Theoretical Chemistry. 975 - 1-3, pp. 106 - 110. (Holanda): 2011. ISSN 2210-271X
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2010.12.029>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152211>
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Nombre total d'autors: 4
Font d'impacte:
Índex d'impacte:
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dins del 25%: No
- 53** Escudero, D.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Cooperativity effects between non-covalent interactions: are they important for Z-DNA stability?. 903311 - Chemical Physics Letters. 485 - 1-3, pp. 221 - 225. (Holanda): 2010. ISSN 0009-2614
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2009.11.067>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147587>
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Nombre total d'autors: 5
Font d'impacte: ISI
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Índex d'impacte: 2.28
Revista dins del 25%: No
Posició de publicació: 59
Nombre de revistes a la categoria: 125
Font d'impacte: ISI
Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Índex d'impacte: 2.28
Revista dins del 25%: No
Posició de publicació: 11
Nombre de revistes a la categoria: 32
- 54** Estarellas, C.; Lucas, X.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Erroneous behaviour of the widely used MP2(full)/aug-cc-pVXZ (X=D,T) level of theory for evaluating the BSSE in ion- π complexes. 903311 - Chemical Physics Letters. 114 - 4, pp. 1926 - 1930. (Holanda): 2010. ISSN 0009-2614
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Nombre total d'autors: 5
Revista dins del 25%: No
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 125
Índex d'impacte: 2.28
Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Posició de publicació: 59
Revista dins del 25%: No
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 32
Índex d'impacte: 2.28
- 55** Quiñonero, D.; Kaledin, A.L.; Kuznetsov, A.E.; Geletii, Y.V.; Besson, C.; Hill, C.L.; Musaev, D.G. Computational Studies of the Geometry and Electronic Structure of an All-Inorganic and Homogeneous Tetra-Ru-Polyoxotungstate Catalyst for Water Oxidation and Its Four Subsequent One-Electron Oxidized Forms. 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 114, pp. 535 - 542. (Estats Units d'Amèrica): 2010. ISSN 1089-5639
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 1
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Nombre total d'autors: 7
Font d'impacte: ISI



Índex d'impacte: 2.732
Posició de publicació: 48

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.732
Posició de publicació: 9

Revista dins del 25%: No
Nombre de revistes a la categoria: 125

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: No
Nombre de revistes a la categoria: 32

- 56** García-Raso, A.; Fiol, J.J.; Albertí, F.M.; Lagos, Y.; Torres, M.; Barceló-Oliver, M.; Prieto, M.J.; Moreno, V.; Mata, I.; Molins, E.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. New Chlorido(dimethyl sulfoxide)iridium(III) complexes with N(6)-substituted adenines - Kinetic versus thermodynamic N(9) coordinated adenine isomers. 910604 - European Journal of Inorganic Chemistry. 2010 - 36, pp. 5617 - 5628. (Desconegut): 2010. ISSN 1434-1948

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic.201000821>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152192>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 14

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.732

Posició de publicació: 11

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 43

- 57** Alkorta, I.; Blanco, F.; Deyà, P.M.; Elguero, J.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D. Cooperativity in multiple unusual weak bonds. 909714 - Theoretical Chemistry Accounts. 126 - 1-2, pp. 1 - 14. (Alemanya): 2010. ISSN 1432-881X

DOI: <https://doi.org/10.1007/s00214-009-0690-1>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147975>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 7

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.903

Posició de publicació: 43

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 125

- 58** Mashraqui, S.H.; Betkar, R.; Chandiramani, M.; Quiñonero, D.; Frontera, A. A novel fluoride selective optical chemosensor based on internal charge transfer signaling. 900807 - Tetrahedron Letters. 51, pp. 596 - 599. (Regne Unit): 2010. ISSN 0040-4039

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2009.11.050>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147906>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 5

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.618

Posició de publicació: 20

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 56

- 59** Mashraqui, S.H.; Betkar, R.; Chandiramani, M.; Poonia, K.; Quiñonero, D.; Frontera, A. New 1,8-naphthyridine-based probes for the selective fluorescence signalling of toxic cadmium: synthesis, photophysical studies and molecular modelling. 909109 - Supramolecular Chemistry. 22 - 9, pp. 524 - 531. (Regne Unit): 2010. ISSN 1061-0278



DOI: <https://doi.org/10.1080/10610278.2010.491153>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152193>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 6

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 1.94

Posició de publicació: 47

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 145

- 60** Barceló-Oliver, M.; Estarellas, C.; García-Raso, A.; Terron, A.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Mata, I.; Molins, E.; Deyà, P.M. Experimental and theoretical study of uracil derivatives: the crucial role of weak fluorine-fluorine noncovalent interactions. 912697 - Crystengcomm. 12, pp. 3758 - 3767. (Regne Unit): 2010. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C0CE00048E>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147988>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 9

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 4.006

Posició de publicació: 29

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 145

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 4.006

Posició de publicació: 6

Categoria: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 25

- 61** Barceló-Oliver, M.; Estarellas, C.; García-Raso, A.; Terrón, A.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Molins, E.; Deyà, P.M. Lone pair-pi vs pi-pi interactions in 5-fluoro-1-hexyluracil and 1-hexyluracil: a combined crystallographic and computational study. 912697 - Crystengcomm. 12 - 2, pp. 362 - 365. (Regne Unit): 2010. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/b91311f>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 6

Nombre total d'autors: 8

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 4.183

Posició de publicació: 29

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 145

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 4.183

Posició de publicació: 6

Categoria: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 25

- 62** Quiñonero, D.; Deyà, P.M.; Carranza, M.P.; Rodríguez, A.M.; Jalón, F.A.; Manzano, B.R. Experimental and computational study of the interplay between C-H/pi and anion-pi interactions. 912705 - Dalton Transactions. 39 - 3, pp. 794 - 806. (Regne Unit): 2010. ISSN 1477-9226

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 1

Nombre total d'autors: 6

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 3.647

Posició de publicació: 7

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 43

- 63** Ortiz, M.I.; Soriano, M.L.; Carranza, M.P.; Jalón, F.A.; Steed, J.W.; Mereiter, K.M Rodríguez, A.M.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M.; Manzano, B.R. New [2x2] copper (I) grids as anion receptors. Effect of ligand functionalization on the ability to host counterions by hydrogen bonds. 900752 - Inorganic Chemistry. 49 - 19, pp. 8828 - 8847. (Estats Units d'Amèrica): 2010. ISSN 0020-1669

Tipus de producció: Article científic

Tipus de suport: Revista

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 10

Font d'impacte: ISI

Categoria: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índex d'impacte: 4.325

Revista dins del 25%: Sí

Posició de publicació: 5

Nombre de revistes a la categoria: 43

- 64** García-Raso, A.; Fiol, J. J.; Albertí, F.M.; Lagos, Y.; Torres, M.; Barceló-Oliver, M.; Prieto, M.J.; Moreno, V.; Mata, I.; Molins, E.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. New chlorido(dimethyl sulfoxide)iridium (III) complexes with N(6)-adenine substituted adenines- kinetic N(7) versus thermodynamic N(9) coordinated adenine isomers. 910604 - European Journal of Inorganic Chemistry. 2010 - 36, pp. 5617 - 5628. (Desconegut): 2010. ISSN 1434-1948

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic.201000821>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152194>

Tipus de producció: Article científic

Tipus de suport: Revista

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 14

Font d'impacte: ISI

Categoria: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índex d'impacte: 2.909

Revista dins del 25%: No

Posició de publicació: 11

Nombre de revistes a la categoria: 43

- 65** García-Raso, A.; Fiol, J.J.; Albertí, F.M.; Lagos, Y.; Torres, M.; Barceló-Oliver, M.; Prieto, M.J.; Moreno, V.; Mata, I.; Molins, E.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. New Chlorido(dimethyl sulfoxide)iridium(III) Complexes with N6-Substituted Adenines ¿ Kinetic N(7) versus Thermodynamic N(9) Coordinated Adenine Isomers. 910604 - European Journal of Inorganic Chemistry. 2010 - 36, pp. 5617 - 5628. (Desconegut): 2010. ISSN 1434-1948

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic.201000821>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152195>

Tipus de producció: Article científic

Tipus de suport: Revista

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 14

Font d'impacte: ISI

Categoria: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índex d'impacte: 2.909

Revista dins del 25%: No

Posició de publicació: 11

Nombre de revistes a la categoria: 43

- 66** Quiñonero, D.; Musaev, D.G.; Morokuma, K. Computational insights to the mechanism of alkene epoxidation by manganese-based catalysts in the presence of bicarbonate. 910422 - Journal of Molecular Structure-Theochem. 903, pp. 115 - 122. (Holanda): 2009. ISSN 0166-1280

Tipus de producció: Article científic

Tipus de suport: Revista

Posició de signatura: 1

Nombre total d'autors: 3

Font d'impacte: ISI

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índex d'impacte: 1.216

Revista dins del 25%: No

Posició de publicació: 85

Nombre de revistes a la categoria: 121

- 67** Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Interplay between cation- π and hydrogen bonding interactions: Are non-additivity effects additive?. 903311 - Chemical Physics Letters. 479 - 4-6, pp. 316 - 320. (Holanda): 2009. ISSN 0009-2614
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2009.08.035>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148666>
Tipus de producció: Article científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 3
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Nombre total d'autors: 4
Revista dins del 25%: No
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 121
Índex d'impacte: 2.291
Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Posició de publicació: 51
Revista dins del 25%: No
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 33
Índex d'impacte: 2.291
Posició de publicació: 12
- 68** Escudero, D.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Theoretical and Crystallographic Study of edge-to-face aromatic interactions between pyridine moieties and benzene. 903311 - Chemical Physics Letters. 468, pp. 280 - 285. (Holanda): 2009. ISSN 0009-2614
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2008.12.007>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147657>
Tipus de producció: Article científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Nombre total d'autors: 5
Revista dins del 25%: No
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 121
Índex d'impacte: 2.169
Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Posició de publicació: 51
Revista dins del 25%: No
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 33
Índex d'impacte: 2.169
Posició de publicació: 12
- 69** Estarellas, C.; Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Theoretical ab initio study of the interplay between hydrogen bonding, cation- π and π - π interactions. 909714 - Theoretical Chemistry Accounts. 122, pp. 325 - 332. (Alemanya): 2009. ISSN 1432-881X
DOI: <https://doi.org/10.1007/s00214-009-0517-0>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148556>
Tipus de producció: Article científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Nombre total d'autors: 5
Revista dins del 25%: No
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 121
Índex d'impacte: 2.584
Posició de publicació: 45
- 70** Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Alkorta, I.; Deyà, P.M.; Elguero, J. Energetic vs synergetic stability: a theoretical study. 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 113 - 13, pp. 3266 - 3273. (Estats Units d'Amèrica): 2009. ISSN 1089-5639
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp811345e>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148510>



Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 6

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.899

Posició de publicació: 39

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.899

Posició de publicació: 8

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 121

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 33

- 71** Lucas, X.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M. Counterintuitive Substituent Effect of the Ethynyl Group in Ion- π Interactions. 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 113 - 38, pp. 10367 - 10375. (Estats Units d'Amèrica): 2009. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp905701p>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148664>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 4

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.899

Posició de publicació: 39

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.899

Posició de publicació: 8

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 121

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 33

- 72** Lucas, X.; Estarellas, C.; Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Very long range effects: cooperativity between anion- π and hydrogen bonding interactions. 910825 - Chemphyschem. 10 - 13, pp. 2256 - 2264. (Alemanya): 2009. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.200900157>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152191>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 4

Nombre total d'autors: 6

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 3.453

Posició de publicació: 33

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 3.453

Posició de publicació: 5

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 121

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 33

- 73** Alkorta, I.; Blanco, F.; Elguero, J.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Simultaneous interaction of tetrafluoroethene with anions and hydrogen-bond donors: a cooperativity study. 913200 - Journal Of Chemical Theory And Computation. 5 - 4, pp. 1186 - 1194. (Estats Units d'Amèrica): 2009. ISSN 1549-9618

DOI: <https://doi.org/10.1021/ct800444e>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148555>

**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 7**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 4.804**Posició de publicació:** 18**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 4.804**Posició de publicació:** 2**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 121**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 33

- 74** Estarellas, C.; Rotger, M.C.; Capó, M.; Quiñero, D.; Frontera, A.; Costa, A.; Deyà, P.M. Anion- π interactions in four-membered rings. 910471 - Organic Letters. 11 - 9, pp. 1987 - 1990. (Estats Units d'Amèrica): 2009. ISSN 1523-7060

DOI: <https://doi.org/10.1021/ol900470r>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148524>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 7**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 5.42**Posició de publicació:** 4**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, ORGANIC**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 57

- 75** Geletii, Y.V.; Besson, C.; Hou, Y.; Yin, Q.; Musaev, D.G.; Quiñero, D.; Cao, R.; Hardcastle, K.I.; Proust, A.; Kögerler, P.; Hill, C.L. Structural, Physicochemical, and Reactivity Properties of an All-Inorganic, Highly Active Tetra-ruthenium Homogeneous Catalyst for Water Oxidation. 900665 - Journal of the American Chemical Society. 131, pp. 17360 - 17370. (Estats Units d'Amèrica): American Chemical Society, 2009. ISSN 0002-7863

Tipus de producció: Artículo científico**Posició de signatura:** 6**Nombre total d'autors:** 11**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 8.58**Posició de publicació:** 7**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 140

- 76** García-Raso, A.; Albertí, F.M.; Fiol, J.J.; Tasada, A.; Barceló-Oliver, M.; Molins, E.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñero, D.; Deyà, P.M. 2-Aminopyrimidine derivatives exhibiting anion- π interactions: a combined crystallographic and theoretical study. 911335 - Crystal Growth & Design. 9 - 5, pp. 2363 - 2376. (Estats Units d'Amèrica): 2009. ISSN 1528-7483

DOI: <https://doi.org/10.1021/cg801245g>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148322>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 10**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 4.162**Posició de publicació:** 23**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 140**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 4.162**Posició de publicació:** 4**Categoria:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 25

Font d'impacte: ISI**Índex d'impacte:** 4.162**Posició de publicació:** 23**Categoria:** MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 214

- 77** Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Interplay Between Anion- π and Hydrogen Bonding Interactions. 900660 - Journal of Computational Chemistry. 30 - 1, pp. 75 - 82. (Estats Units d'Amèrica): 2009. ISSN 0192-8651

DOI: <https://doi.org/10.1002/jcc.21031>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/152189>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 4**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 4.297**Posició de publicació:** 28**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 140

- 78** Escudero, D.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M. On the importance of the inclusion of the basis set superposition error counterpoise correction during optimization of ion- π complexes. 903311 - Chemical Physics Letters. 455 - 4-6, pp. 325 - 330. (Holanda): 2008. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2008.02.074>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/152188>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 4**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.169**Posició de publicació:** 47**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dins del 25%:** No**Nombre de revistes a la categoria:** 113**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.169**Posició de publicació:** 11**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR &
CHEMICAL**Revista dins del 25%:** No**Nombre de revistes a la categoria:** 31

- 79** Escudero, D.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M. Interplay between cation- π and hydrogen bonding interactions. 903311 - Chemical Physics Letters. 456 - 4-6, pp. 257 - 261. (Holanda): 2008. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2008.03.028>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147641>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 4**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.169**Posició de publicació:** 47**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dins del 25%:** No**Nombre de revistes a la categoria:** 113**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.169**Posició de publicació:** 11**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR &
CHEMICAL**Revista dins del 25%:** No**Nombre de revistes a la categoria:** 31

- 80** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M.; Alkorta, I.; Elguero, J. Interaction of positively and negatively charged aromatic hydrocarbons with benzene and triphenylene: Towards a model of pure organic insulators. 903311 - Chemical Physics Letters. 460, pp. 406 - 410. (Holanda): 2008. ISSN 0009-2614
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2008.06.028>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147655>
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Nombre total d'autors: 5
Revista dins del 25%: No
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 113
Índex d'impacte: 2.169
Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Posició de publicació: 47
Revista dins del 25%: No
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 31
Índex d'impacte: 2.169
Posició de publicació: 11
- 81** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Escudero, D.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P.M. MP2 Study of Synergistic Effects Between X-H/ π (X=C,N,O) and π - π Interactions. 909714 - Theoretical Chemistry Accounts. 120 - 4-6, pp. 385 - 393. (Alemanya): 2008. ISSN 1432-881X
DOI: <https://doi.org/10.1007/s00214-008-0416-9>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152174>
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 1
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Nombre total d'autors: 6
Revista dins del 25%: No
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 113
Índex d'impacte: 2.37
Posició de publicació: 43
- 82** Estarellas, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Ballester, P.; Morey, J.; Costa, A.; Deyà, P.M. MP2 study of the dual sigma/ π anion-binding affinity of fluorinated phthalic acid anhydrides. 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 112 - 7, pp. 1622 - 1626. (Estats Units d'Amèrica): 2008. ISSN 1089-5639
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp710572f>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147636>
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Nombre total d'autors: 7
Revista dins del 25%: No
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 113
Índex d'impacte: 2.871
Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Posició de publicació: 33
Revista dins del 25%: Sí
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 31
Índex d'impacte: 2.871
Posició de publicació: 7
- 83** Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Interplay between edge-to-face aromatic and hydrogen-bonding interactions. 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 112, pp. 6017 - 6022. (Estats Units d'Amèrica): 2008. ISSN 1089-5639
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp802370s>



Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148017>

Tipus de producció: Article científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 4

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.871

Posició de publicació: 33

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.871

Posició de publicació: 7

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 113

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 31

- 84** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M. High-Level Ab Initio Study of Anion- π Interactions in Pyridine and Pyrazine Rings Coordinated to Ag(I). 910825 - Chemphyschem. 9 - 3, pp. 397 - 399. (Alemanya): 2008. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.200700788>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152186>

Tipus de producció: Article científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 3

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 3.636

Posició de publicació: 25

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 3.636

Posició de publicació: 3

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 113

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 31

- 85** Rotger, C.; Soberats, B.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Balllester, P.; Benet-Buchholz, J.; Deyà, P.M.; Costa, A. Crystallographic and Theoretical Evidence of Anion- π and Hydrogen-Bonding Interactions in a Squaramide- π -Nitrate Salt. 910608 - European Journal of Organic Chemistry. 2008 - 11, pp. 1864 - 1868. (Alemanya): 2008. ISSN 1434-193X

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejoc.200701209>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152187>

Tipus de producció: Article científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 8

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 3.016

Posició de publicació: 13

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 55

- 86** Barrios, L.A.; Aromi, G.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M.; Gámez, P.; Roubeau, O.; Shotton, E.; Teat, S.J. Coordination complexes exhibiting anion- π interactions: synthesis, structure and theoretical studies. 900752 - Inorganic Chemistry. 47, pp. 5873 - 5881. (Estats Units d'Amèrica): 2008. ISSN 0020-1669

DOI: <https://doi.org/10.1021/ic800215r>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147643>

Tipus de producció: Article científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 9

Tipus de suport: Revista



Font d'impacte: ISI
Índex d'impacte: 4.147
Posició de publicació: 4

Categoria: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dins del 25%: Sí
Nombre de revistes a la categoria: 43

- 87** Quiñonero, D.; Escudero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M. Molecular interaction potential with polarization (MIPp) study of the interplay between anion- π and hydrogen bonding interactions. 202112 - The Open Chemical Physics Journal. 1, pp. 36 - 41. (Estats Units d'Amèrica): Bentham Science Publishers Ltd., 2008. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.2174/1874412500801010036>>. ISSN 1874-4125

DOI: <https://doi.org/10.2174/1874412500801010036>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/1491>

Tipus de producció: Artículo científico

Tipus de suport: Revista

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 4

- 88** Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Theoretical and crystallographic study of the dual sigma/ π anion binding affinity of quinolininium cation. 913200 - Journal Of Chemical Theory And Computation. 4, pp. 1981 - 1989. (Estats Units d'Amèrica): 2008. ISSN 1549-9618

DOI: <https://doi.org/10.1021/ct800332y>

Tipus de producció: Artículo científico

Tipus de suport: Revista

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 4

Font d'impacte: ISI

Categoria: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índex d'impacte: 4.308

Revista dins del 25%: Sí

Posició de publicació: 17

Nombre de revistes a la categoria: 125

- 89** Garau, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Escudero, D.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P.M. MP2 study of anion- π complexes of trifluoro-s-triazine with tetrahedral and octahedral anions. 903311 - Chemical Physics Letters. 438 - 1-3, pp. 104 - 108. (Holanda): 2007. ISSN 0009-2614

Tipus de producció: Artículo científico

Tipus de suport: Revista

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 7

Font d'impacte: ISI

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índex d'impacte: 2.207

Revista dins del 25%: No

Posició de publicació: 42

Nombre de revistes a la categoria: 110

Font d'impacte: ISI

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Índex d'impacte: 2.207

Revista dins del 25%: No

Posició de publicació: 12

Nombre de revistes a la categoria: 32

- 90** Alkorta, I.; Quiñonero, D.; Garau, C.; Frontera, A.; Elguero, J.; Deyà, P. M. Dual Cation and Anion Acceptor Molecules. The case of $(\eta^6\text{-C}_6\text{H}_6)(\eta^6\text{-C}_6\text{F}_6)\text{Cr}(0)$ Complex. 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 111, pp. 3137 - 3142. (Estats Units d'Amèrica): 2007. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp070324a>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147983>

Tipus de producció: Artículo científico

Tipus de suport: Revista

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 6

Font d'impacte: ISI

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índex d'impacte: 2.918

Revista dins del 25%: No

**Posició de publicació:** 28**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.918**Posició de publicació:** 6**Nombre de revistes a la categoria:** 110**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 32

- 91** Quinonero D.; Frontera, A.; Escudero, D.; Ballester, P.; Costa A.; Deya P.M. A theoretical study of anion- π interactions in seven-membered rings. 910825 - Chemphyschem. 8 - 8, pp. 1182 - 1187. (Alemanya): 2007. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.200700100>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147985>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 6**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 3.502**Posició de publicació:** 23**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 3.502**Posició de publicació:** 2**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 110**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 32

- 92** García-Raso, A.; Albertí, F.; Fiol, J.; Tasada, A.; Barceló-Oliver, M.; Molins, E.; Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P. A combined experimental and theoretical study of anion- π interactions in bis(pyrimidine) salts. 910608 - European Journal of Organic Chemistry. 2007 - 35, pp. 5821 - 5825. (Alemanya): 2007. ISSN 1434-193X

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejoc.200700809>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/152175>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 10**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.914**Posició de publicació:** 13**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, ORGANIC**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 56

- 93** Frontera A.; Quinonero D.; Costa A.; Ballester P.; Deya P.M. MP2 study of cooperative effects between cation- π , anion- π and π - π interactions. 900672 - New Journal of Chemistry. 31 - 4, pp. 556 - 560. (França): 2007. ISSN 1144-0546

Tipus de producció: Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 5**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.651**Posició de publicació:** 28**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 127

- 94** Escudero, D.; Frontera, A.; Quinonero D.; Costa A.; Ballester, P. Deya P.M. Induced-Polarization Energy Map: A Helpful Tool for Predicting Geometric Features of Anion- π Complexes. 913200 - Journal Of Chemical Theory And Computation. 3 - 6, pp. 2098 - 2107. (Estats Units d'Amèrica): 2007. ISSN 1549-9618



DOI: <https://doi.org/10.1021/ct700122y>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147990>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 6

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 4.308

Posició de publicació: 16

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 127

- 95** García-Raso, A.; Albertí, F.; Fiol, J.; Tasada, A.; Barceló-Oliver, M.; Molins, E.; Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P. Anion- π interactions in bisadenine derivatives: a combined crystallographic and theoretical study. 900752 - Inorganic Chemistry. 46 - 25, pp. 10724 - 10735. (Estats Units d'Amèrica): 2007. ISSN 0020-1669

DOI: <https://doi.org/10.1021/ic701555n>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147996>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 10

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 4.123

Posició de publicació: 4

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 43

- 96** Frontera, A.; Quiñonero, D.; Garau, C.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P.M. i Pichierri, F. A theoretical ab initio study of [n.n]paracyclophane complexes with cations. 903311 - Chemical Physics Letters. 417, pp. 371 - 377. (Holanda): 2006. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2005.10.038>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148470>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 7

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.462

Posició de publicació: 34

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 108

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.462

Posició de publicació: 9

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 31

- 97** Saczewski, J.; Frontera, A.; Gdaniec, M.; Brzozowski, Z.; Saczewski, F.; Tabin, P.; Quiñonero, D. i Deyà, P.M. Synthesis, X-Ray structure analysis and computational studies of novel Bis(thiocarbamoyl) Disulfides with non-covalent S $\cdots$ N and S $\cdots$ S interactions. 903311 - Chemical Physics Letters. 422 - 1-3, pp. 234 - 239. (Holanda): 2006. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2006.02.022>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148327>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 8

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.462

Posició de publicació: 34

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 108

**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.462**Posició de publicació:** 9**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dins del 25%:** No**Nombre de revistes a la categoria:** 31

- 98** Frontera, A.; Quinonero, D.; Garau, C.; Deyà, P.M. i Pichierri, F. Affinity of ferrocene and (1,1')(3,3') [3,3]ferrocenophane to cations. 903311 - Chemical Physics Letters. 424, pp. 204 - 208. (Holanda): 2006. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2006.04.027>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148530>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 5**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.462**Posició de publicació:** 34**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dins del 25%:** No**Nombre de revistes a la categoria:** 108**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.462**Posició de publicació:** 9**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dins del 25%:** No**Nombre de revistes a la categoria:** 31

- 99** Quiñonero, D.; Morokuma, K.; Geletii, Y.V.; Hill, C.L.; Musaev, D.G. A Density Functional Study of Geometry and Electronic Structures of [(SiO₄) (MII) ₂ (OH)₂W₁₀O₃₂]₄⁻, M = Mo, Ru and Rh. 908997 - Journal of Molecular Catalysis A-Chemical. 262, pp. 227 - 235. (Holanda): 2006. ISSN 1381-1169

Tipus de producció: Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 5**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.511**Posició de publicació:** 32**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dins del 25%:** No**Nombre de revistes a la categoria:** 108

- 100** Frontera, A.; Quinoñero, D.; Garau, C.; Ballester, P.; Costa, A. i Deyà, P.M. Ab Initio Study of [n.n]Paracyclophane (n = 2, 3) Complexes with Cations: Unprecedented Through-Space Substituent Effects. 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 110, pp. 5144 - 5148. (Estats Units d'Amèrica): 2006. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp056976l>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148290>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 6**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 3.047**Posició de publicació:** 25**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 108**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 3.047**Posició de publicació:** 5**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 31

- 101** Frontera, A.; Quinonero, D.; Garau, C.; Costa, A.; Ballester, P. i Deyà, P.M. MP2 Study of Cation-(pi)n-pi Interactions (n = 1-4). 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 110, pp. 9307 - 9309. (Estats Units d'Amèrica): 2006. ISSN 1089-5639
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp062176e>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147624>
Tipus de producció: Article científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Nombre total d'autors: 6
Revista dins del 25%: Sí
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 108
Índex d'impacte: 3.047
Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Posició de publicació: 25
Revista dins del 25%: Sí
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 31
Índex d'impacte: 3.047
Posició de publicació: 5
- 102** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Garau, C.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P.M. Interplay Between Cation-pi, Anion-pi and pi-pi Interactions. 910825 - Chemphyschem. 7 - 12, pp. 2487 - 2491. (Alemanya): 2006. ISSN 1439-4235
DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.200600343>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152164>
Tipus de producció: Article científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Nombre total d'autors: 6
Revista dins del 25%: Sí
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 108
Índex d'impacte: 3.449
Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Posició de publicació: 22
Revista dins del 25%: Sí
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 31
Índex d'impacte: 3.449
Posició de publicació: 2
- 103** Frontera, A.; Morey, J.; Oliver, A.; Piña, M.N.; Quinonero, D.; Costa, A.; Ballester, P.; Deyà, P.M. i Anslyn, E.V. Rational Design, Synthesis and Application of a New Receptor for the Molecular Recognition of Tricarboxylate Salts in Aqueous Media. 900789 - Journal of Organic Chemistry. 71 - 19, pp. 7185 - 7195. (Estats Units d'Amèrica): American Chemical Society, 2006. ISSN 0022-3263
DOI: <https://doi.org/10.1021/jo0609327>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147586>
Tipus de producció: Article científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, ORGANIC
Nombre total d'autors: 9
Revista dins del 25%: Sí
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 56
Índex d'impacte: 3.79
Posició de publicació: 7
- 104** Bobadova-Parvanova, Petia; Wang, Qingfang; Quinonero-Santiago, David; Morokuma, Keiji; Musaev, Djamaladdin G. Does Dinitrogen Hydrogenation Follow Different Mechanisms for [(η⁵-C₅Me₄H)Zr]₂(μ₂,η₂,η₂-N₂) and {[PhP(CH₂SiMe₂NSiMe₂CH₂)PPh]Zr}₂(μ₂,η₂,η₂-N₂) Complexes? A Computational Study. 900665 - Journal of the American Chemical Society. 128, pp. 11391 - 11403. (Estats Units d'Amèrica): American Chemical Society, 2006. ISSN 0002-7863

**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 5**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 7.696**Posició de publicació:** 7**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 124

- 105** Petia Bobadova-Parvanova; David Quiñonero-Santiago; Keiji Morokuma; Djamaladdin G. Musaev. Theoretical Study of the Structure and Properties of $[(\eta^5\text{-C}_5\text{Me}_4\text{H})_2\text{Zr}]_2(\mu_2, \eta^2, \eta^2\text{-N}_2)$. 913200 - Journal Of Chemical Theory And Computation. 2, pp. 336 - 341. (Estats Units d'Amèrica): 2006. ISSN 1549-9618

Tipus de producció: Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 4**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 3.627**Posició de publicació:** 20**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 124

- 106** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Garau, C.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P. M.; Pichierri, F. Counterintuitive affinity of $[\text{2.2}]$ paracyclophane to cations. 903311 - Chemical Physics Letters. 408, pp. 59 - 64. (Holanda): 2005. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2005.03.150>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147659>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 7**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.438**Posició de publicació:** 32**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dins del 25%:** No**Nombre de revistes a la categoria:** 111**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.438**Posició de publicació:** 8**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 31

- 107** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Garau, C.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P. M. Ab Initio Investigations of Lithium Insertion in Boron and Nitrogen-Doped Single-Walled Carbon Nanotubes. 903311 - Chemical Physics Letters. 411, pp. 256 - 261. (Holanda): 2005. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2005.06.035>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148558>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.438**Posició de publicació:** 32**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dins del 25%:** No**Nombre de revistes a la categoria:** 111**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.438**Posició de publicació:** 8**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 31

- 108** David Quiñonero; Carolina Garau; Antonio Frontera; Pablo Ballester; Antoni Costa; Pere M. Deyà. Structure and Binding Energy of Anion- π and Cation- π Complexes: A Comparison of MP2, RI-MP2, DFT, and DF-DFT Methods. 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 109, pp. 4632 - 4637. (Estats Units d'Amèrica): 2005. ISSN 1089-5639
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp044616c>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148287>
Tipus de producció: Article científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Nombre total d'autors: 6
Revista dins del 25%: Sí
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 111
Índex d'impacte: 2.898
Revista dins del 25%: Sí
Posició de publicació: 24
Nombre de revistes a la categoria: 31
Font d'impacte: ISI
Índex d'impacte: 2.898
Posició de publicació: 6
- 109** Quiñonero, D.; Garau, C.; Frontera, A.; Costa, A.; Ballester, P.; Deyà, P. M. Approximate Additivity of Anion- π Interactions: An Ab Initio Study on anion- π , anion- π_2 and anion- π_3 . 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 109, pp. 9341 - 9345. (Estats Units d'Amèrica): 2005. ISSN 1089-5639
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp053380p>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148529>
Tipus de producció: Article científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Nombre total d'autors: 6
Revista dins del 25%: Sí
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 111
Índex d'impacte: 2.898
Revista dins del 25%: Sí
Posició de publicació: 24
Nombre de revistes a la categoria: 31
Font d'impacte: ISI
Índex d'impacte: 2.898
Posició de publicació: 6
- 110** David Quinonero; Yan Wang; Keiji Morokuma; Lyuba A. Khavrutskii; Bogdan Botar; Yurii V. Geletii; Craig L. Hill; Djamaladdin G. Musaev. The Role of the Central Atom in Structure and Reactivity of Polyoxyometalates with Adjacent d-Electron Metal Sites. Computational and Experimental Studies of γ -[(X_n+O₄)RuIII₂(OH)₂(MFM)10O₃₂](8-n)- for MFM = Mo and W, and X = AlIII, SiIV, PV, and SVI. 909613 - Journal of Physical Chemistry B. 110, pp. 170 - 173. (Estats Units d'Amèrica): 2005. ISSN 1520-6106
Tipus de producció: Article científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL
Nombre total d'autors: 8
Revista dins del 25%: Sí
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 111
Índex d'impacte: 4.033
Revista dins del 25%: Sí
Posició de publicació: 14
Nombre de revistes a la categoria: 111
- 111** Frontera, A.; Orell, M.; Garau, C.; Quiñonero, D.; Molins, E.; Mata, I.; Morey, J. Preparation, Solid-State Characterization, and Computational Study of a Crown Ether Attached to a Squaramide. 910471 - Organic Letters. 7, pp. 1437 - 1440. (Estats Units d'Amèrica): 2005. ISSN 1523-7060
DOI: <https://doi.org/10.1021/ol0474608>



Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147656>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 7

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 4.368

Posició de publicació: 5

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 55

- 112** Frontera, A.; Garau, C.; Quiñonero, D.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P.M. A Theoretical Ab Initio Study of the Capability of Several Binding Units for the Molecular Recognition of Anions. 910608 - European Journal of Organic Chemistry. 2005 - 1, pp. 179 - 183. (Alemanya): 2005. ISSN 1434-193X

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejoc.200400539>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152172>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 6

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.548

Posició de publicació: 16

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 55

- 113** Frontera, A.; Saczewski, F.; Gdaniec, M.; Dziemidowicz-Borys, E.; Kurland, A.; Deyà, P. M.; Quiñonero, D.; Garau, C. Anion- π interactions in cyanuric acids. A combined crystallographic and computational study. 908895 - Chemistry-A European Journal. 11, pp. 6560 - 6567. (Alemanya): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2005. ISSN 0947-6539

DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.200500783>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148522>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 8

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 4.907

Posició de publicació: 8

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 125

- 114** David Quiñonero; Keiji Morokuma; Djamaladdin Musaev; Rubén Mas-Balleste; Lawrence Que Jr. Metal-Peroxo versus Metal-Oxo Oxidants in Non-Heme Iron-Catalyzed Olefin Oxidations: Computational and Experimental Studies on the Effect of Water. 900665 - Journal of the American Chemical Society. 127 - 18, pp. 6548 - 6549. (Estats Units d'Amèrica): American Chemical Society, 2005. ISSN 0002-7863

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 5

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 7.419

Posició de publicació: 6

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 125

- 115** Frontera, A.; Garau, C.; Quiñonero, D.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P. M. Unexpected Binding Affinity of [2.2]Paracyclophane to Cations. 200988 - Internet Electronic Journal of Molecular Design. 4 - 4, pp. 264 - 269. (Estats Units d'Amèrica): BioChem Press, 2005. ISSN 1538-6414

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2005.03.150>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147747>

**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Tipus de suport:** Revista

- 116** Garau, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Ballester, P.; Costa, A.; Deya, P.M. Ab initio Investigations of Lithium Diffusion in Single-Walled Carbon Nanotubes. 903310 - Chemical Physics. 297 - 1-3, pp. 85 - 91. (Holanda): 2004. ISSN 0301-0104

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2003.10.004>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/152170>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 6**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.316**Posició de publicació:** 9**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dins del 25%:** No**Nombre de revistes a la categoria:** 34

- 117** Garau, C.; Frontera, A.; Quinonero, D.; Costa, A.; Ballester, P.; Deyà, P. M. Structural and energetic features of single-walled carbon nanotube junctions: a theoretical ab initio study. 903310 - Chemical Physics. 303, pp. 265 - 270. (Holanda): 2004. ISSN 0301-0104

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2004.06.022>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147651>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 6**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.316**Posició de publicació:** 9**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dins del 25%:** No**Nombre de revistes a la categoria:** 34

- 118** Garau, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Ballester, P.; Costa, A. i Deya, P.M. Cation-pi versus anion-pi interactions: a comparative ab initio study based on energetic, electron charge density and aromatic features. 903311 - Chemical Physics Letters. 392, pp. 85 - 89. (Holanda): 2004. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2004.05.049>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147637>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 6**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.438**Posició de publicació:** 8**Tipus de suport:** Revista**Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 34

- 119** Garau, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P. M. Cation-pi versus Anion-pi interactions: a complete pi-orbital analysis. 903311 - Chemical Physics Letters. 399, pp. 220 - 225. (Holanda): 2004. ISSN 0009-2614

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147645>**Tipus de producció:** Artículo científico**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 6**Font d'impacte:** ISI**Tipus de suport:** Revista



Índex d'impacte: 2.438
Posició de publicació: 8

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dins del 25%: Sí
Nombre de revistes a la categoria: 34

- 120** Garau, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Ballester, P.; Costa, A.; Deya, P.M. Cation-pi versus Anion-pi Interactions: Energetic, Charge Transfer, and Aromatic Aspects. 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 108 - 43, pp. 9423 - 9427. (Estats Units d'Amèrica): 2004. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp047534x>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152171>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 6

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.639

Posició de publicació: 27

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 106

- 121** Gomila, Rosa M.; Garau, Carolina; Frontera, Antonio; Quinonero, David; Ballester, Pablo; Costa, Antoni; Deya, Pere M. Applicability of the 1H NMR Chemical Shifts Computed by the ab initio/GIAO-HF Methodology to the Study of Geometrical Features of Zn-Porphyrin Dimers. 900807 - Tetrahedron Letters. 45, pp. 9387 - 9391. (Regne Unit): 2004. ISSN 0040-4039

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2004.10.112>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148009>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 7

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.484

Posició de publicació: 15

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 58

- 122** Garau, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Costa, A.; Ballester, P.; Deyà, P.M. s-Tetrazine as a New Binding Unit in Molecular Recognition of Anions. 903311 - Chemical Physics Letters. 370, pp. 7 - 13. (Holanda): 2003. ISSN 0009-2614

DOI: [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(03\)00020-4](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(03)00020-4)

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147901>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 6

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.438

Posició de publicació: 7

Tipus de suport: Revista

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 33

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.438

Posició de publicació: 15

Categoria: PHYSICS, CONDENSED MATTER

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 87

- 123** Garau, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Costa, A.; Ballester, P.; Deya, P. M. Lithium Diffusion in Single-Walled Carbon Nanotubes: A Theoretical Study. 903311 - Chemical Physics Letters. 374, pp. 548 - 555. (Holanda): 2003. ISSN 0009-2614



DOI: [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(03\)00748-6](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(03)00748-6)

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147913>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 6

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.438

Posició de publicació: 7

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.438

Posició de publicació: 15

Tipus de suport: Revista

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 33

Categoria: PHYSICS, CONDENSED MATTER

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 87

- 124** Garau, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Ballester, P.; Costa, A.; Deya, P.M. Anion- π interactions in five-membered rings: a combined crystallographic and ab initio study. 903311 - Chemical Physics Letters. 382 - 5-6, pp. 534 - 540. (Holanda): 2003. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2003.10.056>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152169>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 6

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.438

Posició de publicació: 7

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.438

Posició de publicació: 15

Tipus de suport: Revista

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 33

Categoria: PHYSICS, CONDENSED MATTER

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 87

- 125** Garau, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Ballester, P.; Costa, A.; Deya, P.M. A Topological Analysis of the Electron Density in Anion- π Interactions. 910825 - Chemphyschem. 4, pp. 1344 - 1348. (Alemanya): 2003. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.200300886>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147635>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 6

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 3.316

Posició de publicació: 18

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 3.316

Posició de publicació: 4

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 3.316

Posició de publicació: 9

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 101

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 33

Categoria: PHYSICS, CONDENSED MATTER

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 87



- 126** Frontera, A.; Garau, C.; Quiñonero, D.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P. M. Weak CH/ π Interaction Participates in the Diastereoselectivity of a Host-Guest Complex in the Presence of Six Strong Hydrogen Bonds. 910471 - Organic Letters. 5 - 7, pp. 1135 - 1138. (Estats Units d'Amèrica): 2003. ISSN 1523-7060
DOI: <https://doi.org/10.1021/ol034247n>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147986>
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, ORGANIC
Nombre total d'autors: 6
Revista dins del 25%: Sí
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 55
Índex d'impacte: 4.092
Posició de publicació: 5
- 127** Garau, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P. M. Dual binding mode of s-triazine to anions and cations. 910471 - Organic Letters. 5 - 13, pp. 2227 - 2229. (Estats Units d'Amèrica): 2003. ISSN 1523-7060
DOI: <https://doi.org/10.1021/ol034650u>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147987>
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, ORGANIC
Nombre total d'autors: 6
Revista dins del 25%: Sí
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 55
Índex d'impacte: 4.092
Posició de publicació: 5
- 128** Garau, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P. M. Anion- π Interactions: Must the Aromatic Ring Be Electron Deficient?. 900672 - New Journal of Chemistry. 27, pp. 211 - 214. (França): 2003. ISSN 1144-0546
DOI: <https://doi.org/10.1039/b210110f>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147497>
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Nombre total d'autors: 6
Revista dins del 25%: Sí
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 123
Índex d'impacte: 2.272
Posició de publicació: 25
- 129** David Quiñonero; Djameladdin G. Musaev; Keiji Morokuma. Theoretical Studies of the Complex [(BPMEN)Fe(II)(NCCH₃)₂]²⁺, Precursor of Non-Heme Iron Catalysts for Olefin Epoxidation and Cis-Dihydroxylation. 900752 - Inorganic Chemistry. 42, pp. 8449 - 8455. (Estats Units d'Amèrica): 2003. ISSN 0020-1669
Tipus de producció: Artículo científico
Tipus de suport: Revista
Posició de signatura: 0
Categoria: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Nombre total d'autors: 3
Revista dins del 25%: Sí
Font d'impacte: ISI
Nombre de revistes a la categoria: 46
Índex d'impacte: 3.389
Posició de publicació: 6
- 130** Quiñonero, D.; Prohens, R.; Frontera, A.; Ballester, P.; Garau, C.; Costa, A.; Deyà, P. M. A theoretical study of aromaticity in squaramide complexes with anions. 903311 - Chemical Physics Letters. 351 - 1-2, pp. 115 - 120. (Holanda): 2002. ISSN 0009-2614



DOI: [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(01\)01295-7](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(01)01295-7)

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152165>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 7

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.526

Posició de publicació: 7

Tipus de suport: Revista

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 31

- 131** David Quiñonero; Carolina Garau; Antonio Frontera; Pablo Ballester; Antonio Costa; Pere M. Deyà. Counterintuitive interactions of Anions with Benzene Derivatives. 903311 - Chemical Physics Letters. 359, pp. 486 - 492. (Holanda): 2002. ISSN 0009-2614

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 6

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.526

Posició de publicació: 7

Tipus de suport: Revista

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 31

- 132** Gomila, R.; Quiñonero, D.; Garau, C.; Frontera, A.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P. M. Predicting Experimental Complexation-Induced Changes in ¹H-NMR Chemical Shifts for Complexes between metalloPorphyrins and ligands Using the ab-Initio/Giao-HF Methodology. 903311 - Chemical Physics Letters. 360 - 3, pp. 72 - 78. (Holanda): 2002. ISSN 0009-2614

DOI: [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(02\)00805-9](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(02)00805-9)

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147551>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 7

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.526

Posició de publicació: 7

Tipus de suport: Revista

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 31

- 133** Deyà, P.M.; Frontera, A.; Suñer, G.A.; Quiñonero, D.; Garau, C.; Costa, A.; Ballester, P. Internal rotation in squaramide and related compounds. A theoretical ab initio study. 909714 - Theoretical Chemistry Accounts. 108, pp. 157 - 167. (Alemanya): 2002. ISSN 1432-881X

DOI: <https://doi.org/10.1007/s00214-002-0373-7>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147552>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 8

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 1.421

Posició de publicació: 48

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 95

- 134** Rosa M. Gomila; David Quiñonero; Carmen Rotger; Carolina Garau; Antonio Frontera; Pablo Ballester; Antonio Costa; Pere M. Deyà. Predicting Experimental Complexation-Induced Changes in ¹H NMR Chemical shift for Complexes between Zinc-Porphyrins and Amines Using the ab initio/GIAO-HF Methodology. 910471 - Organic Letters. 4, pp. 399 - 401. (Estats Units d'Amèrica): 2002. ISSN 1523-7060
Tipus de producció: Article científic **Tipus de suport:** Revista
Posició de signatura: 0
Nombre total d'autors: 8
Font d'impacte: ISI **Categoria:** CHEMISTRY, ORGANIC
Índex d'impacte: 3.715 **Revista dins del 25%:** Sí
Posició de publicació: 5 **Nombre de revistes a la categoria:** 53
- 135** David Quiñonero; Carolina Garau; Antonio Frontera; Pablo Ballester; Antonio Costa; Pere M. Deyà. Quantification of aromaticity in oxocarbons: the problem of the fictitious "nonaromatic" reference system. 908895 - Chemistry-A European Journal. 8, pp. 433 - 438. (Alemanya): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2002. ISSN 0947-6539
Tipus de producció: Article científic **Tipus de suport:** Revista
Posició de signatura: 0
Nombre total d'autors: 6
Font d'impacte: ISI **Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índex d'impacte: 4.238 **Revista dins del 25%:** Sí
Posició de publicació: 9 **Nombre de revistes a la categoria:** 119
- 136** Quiñonero, D.; Garau, C.; Rotger, C.; Frontera, A.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P.M. Anion- π interactions: do they exist?. 900624 - Angewandte Chemie-International Edition. 41 - 18, pp. 3389 - 3392. (Alemanya): 2002. ISSN 1433-7851
DOI: [https://doi.org/10.1002/1521-3773\(20020916\)41:18<3389::AID-ANIE3389>3.0.CO;2](https://doi.org/10.1002/1521-3773(20020916)41:18<3389::AID-ANIE3389>3.0.CO;2)
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152168>
Tipus de producció: Article científic **Tipus de suport:** Revista
Posició de signatura: 0
Nombre total d'autors: 7
Font d'impacte: ISI **Categoria:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índex d'impacte: 7.671 **Revista dins del 25%:** Sí
Posició de publicació: 4 **Nombre de revistes a la categoria:** 119
- 137** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Ballester, P.; Garau, C.; Costa, A.; Deyà, P. M. A Topological Analysis of Charge Density in Complexes between Derivatives of Squaric Acid and Ammonium Cation. 903311 - Chemical Physics Letters. 339, pp. 369 - 374. (Holanda): 2001. ISSN 0009-2614
DOI: [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(01\)00395-5](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(01)00395-5)
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147607>
Tipus de producció: Article científic **Tipus de suport:** Revista
Posició de signatura: 0
Nombre total d'autors: 6
Font d'impacte: ISI **Categoria:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Índex d'impacte: 2.364 **Revista dins del 25%:** No
Posició de publicació: 8 **Nombre de revistes a la categoria:** 30
- 138** Quiñonero, D.; Tomas, S.; Frontera, A.; Ballester, P.; Garau, C.; Costa, A.; Deyà, P.M. OPLS All-Atom Force Field for Squaramides and Squaric Acid. 903311 - Chemical Physics Letters. 350, pp. 331 - 338. (Holanda): 2001. ISSN 0009-2614
DOI: [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(01\)01229-5](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(01)01229-5)



Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147676>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 7

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.364

Posició de publicació: 8

Tipus de suport: Revista

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 30

- 139** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Capó, M.; Ballester, P.; Suñer, G.A.; Garau, C.; Deyà, P.M. The Resonance Model in Amides: A Combined Crystallographic and ab initio Investigation. 900672 - New Journal of Chemistry. 25, pp. 259 - 261. (França): 2001. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/B008260K>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147914>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.44

Posició de publicació: 19

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 118

- 140** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Suñer, G. A.; Morey, J.; Costa A.; Ballester, P.; Deyà, P. M. Squaramide as a binding unit in molecular recognition. 903311 - Chemical Physics Letters. 326, pp. 247 - 254. (Holanda): 2000. ISSN 0009-2614

DOI: [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(00\)00804-6](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(00)00804-6)

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147605>

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 7

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 2.364

Posició de publicació: 6

Tipus de suport: Revista

Categoria: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dins del 25%: Sí

Nombre de revistes a la categoria: 30

- 141** Rosa M. Gomila; David Quiñonero; Antonio Frontera; Pau Ballester; Pere M. Deyà. Ab initio calculations on zinc porphyrins complexed to amines. Geometrical details and NMR chemical shifts. 910422 - Journal of Molecular Structure-Theochem. 531, pp. 381 - 386. (Holanda): 2000. ISSN 0166-1280

Tipus de producció: Artículo científico

Posició de signatura: 0

Nombre total d'autors: 5

Font d'impacte: ISI

Índex d'impacte: 0.961

Posició de publicació: 56

Tipus de suport: Revista

Categoria: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dins del 25%: No

Nombre de revistes a la categoria: 91

- 142** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Tomàs, S.; Suñer, G. A.; Morey, J.; Costa, A.; Ballester, P.; Deyà, P. M. Squaramido-Based Receptors : Applicability of Molecular Interaction Potential to Molecular Recognition of Polyalkylammonium Compounds. 909714 - Theoretical Chemistry Accounts. 104 - 1, pp. 50 - 66. (Alemanya): 2000. ISSN 1432-881X

DOI: <https://doi.org/10.1007/s002149900103>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147604>

Tipus de producció: Artículo científico

Tipus de suport: Revista

**Posició de signatura:** 0**Font d'impacte:** ISI**Índex d'impacte:** 2.263**Posició de publicació:** 22**Categoria:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dins del 25%:** Sí**Nombre de revistes a la categoria:** 91

- 143** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Ballester, P.; Deyà, P. M.A Theoretical Study of Aromaticity in Squaramide and Oxocarbons. 900807 - Tetrahedron Letters. 41, pp. 2001 - 2005. (Regne Unit): 2000. ISSN 0040-4039

DOI: [https://doi.org/10.1016/S0040-4039\(00\)00084-8](https://doi.org/10.1016/S0040-4039(00)00084-8)**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147675>**Tipus de producció:** Artículo científico**Tipus de suport:** Revista**Posició de signatura:** 0**Font d'impacte:** ISI**Categoria:** CHEMISTRY, ORGANIC**Índex d'impacte:** 2.558**Revista dins del 25%:** No**Posició de publicació:** 13**Nombre de revistes a la categoria:** 48

- 144** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M. Anion-pi interactions in molecular recognition. Anion coordination chemistry. pp. 321 - 362. Weinheim(Alemanya): Wiley-Vch, 2011. ISBN 978-3-527-32370-8

Tipus de producció: Capítulo de libro**Tipus de suport:** Llibre**Nombre total d'autors:** 3

- 145** Garau, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P.M. Anion-pi interactions. Recent Research Development Chemical Physics. 5, pp. 227 - 255. Kerala(Índia): 2004. ISBN 81-7895-155-X

Tipus de producció: Capítulo de libro**Tipus de suport:** Llibre

- 146** Escudero, D.; Lucas, X.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P. M. Interplay between ion-pi and hydrogen bonding interactions. 202212 - Trends in Physical Chemistry. 13, pp. 31 - 52. (Índia): 2008. ISSN 0972-4435

Tipus de producció: Review**Tipus de suport:** Revista**Posició de signatura:** 0**Nombre total d'autors:** 6

Treballs presentats en congressos nacionals o internacionals

- 1** **Títol del treball:** Complexes between ions of like charges stabilized by halogen bonds
Nom del congrés: Electronic Structure: principles and Applications
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Toledo, Espanya
Data de celebració: 2018
Data de finalització: 2018
 David Quiñonero; Ibon Alkorta; José Elguero.

- 2** **Títol del treball:** Anion-anion complexes stabilized by halogen bonds.
Nom del congrés: VIII Mediterranean Organic Chemistry Meeting (REQOMED 2017).
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciutat de celebració: Palma de Mallorca, Espanya
Data de celebració: 2017
Data de finalització: 2017



David Quiñonero; Ibon Alkorta; José Elguero. "Book of abstracts, página 25."

- 3** **Nom del congrés:** VIII Mediterranean Organic Chemistry Meeting (REQOMED 2017).
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Comitè organitzador
Ciutat de celebració: Palma de Mallorca, Espanya
Data de celebració: 2017
Data de finalització: 2017
Antonio Frontera; Antonio Bauzá; David Quiñonero; Saikat K. Seth.
- 4** **Títol del treball:** Sigma-Hole Carbon-Bonding Interactions in Carbon-Carbon Double Bonds: An Unnoticed Contact.
Nom del congrés: 11th World Congress of Theoretically and Computational Chemists (WATOC 2017).
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Munich, Alemanya
Data de celebració: 2017
Data de finalització: 2017
Quiñonero, D."Book of Abstracts, PO1-238".
- 5** **Títol del treball:** Anion-Anion and Cation-Cation Halogen and Hydrogen Bonded Complexes.
Nom del congrés: 11th World Congress of Theoretically and Computational Chemists (WATOC 2017).
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciutat de celebració: Munich, Alemanya
Data de celebració: 2017
Data de finalització: 2017
Alkorta, I.; Quiñonero, D.; Mata, I.; Molins, E.; Espinosa, E."Book of Abstracts, I-064".
- 6** **Títol del treball:** σ - and π -hole noncovalent carbon-bonding interactions in C=C bonds.
Nom del congrés: 10th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2016)
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Castellón de la Plana, Espanya
Data de celebració: 2016
Data de finalització: 2016
David Quiñonero. "Book of abstracts, página 215".
- 7** **Títol del treball:** A Thorough Anion- π Interaction Study in Biomolecules: On the Importance of Cooperativity Effects.
Nom del congrés: XXV Reunión Bienal de Química Orgánica
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Nacional
Tipus de participació: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciutat de celebració: Alicante, Espanya
Data de celebració: 2014
Data de finalització: 2014
Bauzá, A.; Frontera, A.; Lucas, X.; Quiñonero, D."Libro de resúmenes, CO-39".
- 8** **Títol del treball:** Long Range Effects in Anion- π Interactions: Their Crucial Role in the Inhibition Mechanism of Mycobacterium Tuberculosis Malate Synthase.
Nom del congrés: XXV Reunión Bienal de Química Orgánica



Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Nacional
Tipus de participació: Participatiu - Ponència oral (comunicació oral)
Ciutat de celebració: Alicante, Espanya
Data de celebració: 2014
Data de finalització: 2014
Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M.; Frontera, A. "Libro de resúmenes, Flash-8".

9 **Títol del treball:** Is the use of diffuse functions essential for the proper description interactions involving anions?

Nom del congrés: Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participatiu - Póster
Ciutat de celebració: Granada, Espanya
Data de celebració: 2013
Data de finalització: 2013
Bauzá, A.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà P. M.

10 **Títol del treball:** Quadrupole Moments and Molecular Polarizabilities Are Key to Describe Substituent Effects in Cation- π Interactions Involving Aromatic Rings

Nom del congrés: QUITEL 2013
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participatiu - Ponència oral (comunicació oral)
Ciutat de celebració: Granada, Espanya
Data de celebració: 2013
Data de finalització: 2013
Quiñonero, D.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Deyà, P.M.

11 **Títol del treball:** Fine tuning of the anion- π interaction

Nom del congrés: International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry, ISMSC-7
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participatiu - Póster
Ciutat de celebració: Dunedin, New Zealand, Nova Zelanda
Data de celebració: 2012
Data de finalització: 2012
Deyà, P. M.; Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Frontera, A.

12 **Títol del treball:** Theoretical ab initio study of anion- π interactions in inorganic rings

Nom del congrés: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA)
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participatiu - Póster
Ciutat de celebració: Barcelona, Espanya
Data de celebració: 2012
Data de finalització: 2012
Bauzá, A.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà P. M.

13 **Títol del treball:** Understanding the origin of the RNA-U1A human protein binding: A theoretical approach

Nom del congrés: X Girona Seminar on theoretical and Computational Chemistry for the Modeling of Biochemical Systems: From Theory to Applications
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participatiu - Póster
Ciutat de celebració: Girona, Espanya



Data de celebració: 2012

Data de finalització: 2012

Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P. M.

14 **Títol del treball:** Theoretical ab initio study of anion- π interactions in inorganic rings

Nom del congrés: VIII escola de química teòrica de la UIB

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Nacional

Tipus de participació: Participatiu - Pòster

Ciutat de celebració: Palma de Mallorca, Espanya

Data de celebració: 2012

Data de finalització: 2012

Bauzá, A.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà P. M.

15 **Títol del treball:** Interplay between ion- π and van der Waals Argon- π interactions

Nom del congrés: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA)

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participatiu - Pòster

Ciutat de celebració: Barcelona, Espanya

Data de celebració: 2012

Data de finalització: 2012

Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M.

16 **Títol del treball:** Self-assembly Hexanuclear Metallacontainer Hosting Halogenated Guest Species and Sustaining Structure of 3D Coordination Framework

Nom del congrés: 9th Spanish-Italian Symposium on Organic Chemistry SISOC-IX

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participatiu - Pòster

Ciutat de celebració: Espanya

Data de celebració: 2012

Data de finalització: 2012

K. Domasevitch; D. Quiñonero; A. Frontera.

17 **Títol del treball:** Efectes de la substitució aromàtica a la formació de l'enllaç d'halogen

Nom del congrés: VII trobada de joves investigadors del paísos catalans

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Nacional

Tipus de participació: Participatiu - Ponencia oral (comunicación oral)

Ciutat de celebració: Palma de Mallorca, Espanya

Data de celebració: 2012

Data de finalització: 2012

Bauzá, A.

18 **Nom del congrés:** VII trobada de joves investigadors del paísos catalans

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Nacional

Tipus de participació: Comitè organitzador

Ciutat de celebració: Palma de Mallorca, Espanya

Data de celebració: 2012

Data de finalització: 2012

David Quiñonero; Miquel Barceló-Oliver; Josefa Donoso; Enrique Gómez; Joan Jesús Fiol; Juan Frau.



- 19** **Títol del treball:** Anion- π interactions in real life
Nom del congrés: Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2011)
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciutat de celebració: Santiago de Compostela, Espanya
Data de celebració: 2011
Data de finalització: 2011
Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "Book of abstracts OC-34".
- 20** **Títol del treball:** Synthetic tripodal squaramido-Based receptors for the complexation of antineoplastic folates in water
Nom del congrés: 6th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Brighton, Reino Unido, Regne Unit
Data de celebració: 2011
Data de finalització: 2011
Entitat organitzadora: 4034 - Royal Society of Chemistry
Quiñonero, D.; López, K.A.; Deyà, P.M.; Morey, J.; Piña, M.N.
- 21** **Títol del treball:** Anion π , lone pair π and F π interactions in nucleobase derivatives
Nom del congrés: XXII Congress of the IUCr
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Madrid, Espanya
Data de celebració: 2011
Data de finalització: 2011
Entitat organitzadora: 4552 - International Union of Crystallography
Molins, E.; Mata, I.; García-Raso, A.; Barceló-Oliver, M.; Albertí, F.M.; Fiol, J.J.; Lagos, Y.; Torres, M.; Terrón, A.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "Acta Cryst. (2011) A67, C600-C601".
- 22** **Títol del treball:** On the direccionalidad of anion- π interactions
Nom del congrés: WORLD ASSOCIATION OF THEORETICAL ORIENTED CHEMISTS
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Santiago de Compostela, Espanya
Data de celebració: 2011
Data de finalització: 2011
Frontera, A.; Estarellas, C.; Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deyà P. M.
- 23** **Títol del treball:** STUDY OF ANION- π INTERACTIONS AND COOPERATIVITY EFFECTS IN RNA-PROTEIN BINDING
Nom del congrés: WORLD ASSOCIATION OF THEORETICAL ORIENTED CHEMISTS
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Espanya
Data de celebració: 2011
Data de finalització: 2011
David Quiñonero; Antonio Frontera; Carolina Estarellas; P. M. Deyà.



- 24** **Títol del treball:** Feasibility of single-walled carbon nanotubes as materials for CO₂ adsorption: a DFT study.
Nom del congrés: Gas separation and gas storage using porous materials.
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciutat de celebració: Lausanne, Suïssa
Data de celebració: 2010
Data de finalització: 2010
D. Quiñonero. "Page 14, book of abstracts".
- 25** **Títol del treball:** DFT Study of H₂ adsorption on single and multi-walled carbon nanotubes
Nom del congrés: Gas separation and gas storage using porous materials
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Lausanne, Suïssa
Data de celebració: 2010
Data de finalització: 2010
Frontera, A.; Estarellas, C.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "Book of abstracts, pag. 19".
- 26** **Títol del treball:** A combined experimental and theoretical study of anion-pi interactions in N⁶- and N⁹-decyl-adenine salts.
Nom del congrés: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2010)
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Oviedo, Espanya
Data de celebració: 2010
Data de finalització: 2010
Frontera, A.; Estarellas, C.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M.; Garcia-Raso, A.; Albertí, F. M.; Fiol, J. J.; Lagos, Y.; Torres, M.; Molins, E.; Mata, I. "P 058, book of abstracts".
- 27** **Títol del treball:** Single-Walled Carbon Nanotubes as Materials for Adsorption and Storage of CO₂: A DFT Study
Nom del congrés: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2010)
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Oviedo, Espanya
Data de celebració: 2010
Data de finalització: 2010
Frontera, A.; Estarellas, C.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "Book of abstracts, pag. 141".
- 28** **Títol del treball:** Interaccions anió-pi en sistemes biològics
Nom del congrés: VI Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Nacional
Tipus de participació: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciutat de celebració: Valencia, Espanya
Data de celebració: 2010
Data de finalització: 2010
Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "Página 30, llibre de resums".



- 29** **Títol del treball:** On the energetics and geometry of relevant interactions in biological systems: Ri-MP2, SCS-Ri-MP2 and CCSD(T) calculations.
Nom del congrés: 3rd EuCheMS Chemistry Congress
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Nuremberg, Alemanya
Data de celebració: 2010
Data de finalització: 2010
Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "Book of Abstracts, pág. 48".
- 30** **Títol del treball:** Experimental and theoretical study of uracil derivatives: the crucial role of weak pi-pi, lone pair-pi and fluorine-fluorine noncovalent interactions
Nom del congrés: 3rd EuCheMS Chemistry Congress
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Nuremberg, Alemanya
Data de celebració: 2010
Data de finalització: 2010
Estarellas, C.; Frontera, A.; Barceló-Oliver, M.; Garcia-Raso, A.; Terron, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "Reference code: 5576_0716".
- 31** **Títol del treball:** DFT Study of CO₂ adsorption on single and multi-walled carbon nanotubes
Nom del congrés: Gas separation and gas storage using porous materials
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Lausanne, Suïssa
Data de celebració: 2010
Data de finalització: 2010
Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "Book of abstracts, pag. 20".
- 32** **Títol del treball:** Anion-pi interactions in four-membered rings.
Nom del congrés: Reunión científica bioinorgánica 2009
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciutat de celebració: Puigderros, Espanya
Data de celebració: 2009
Data de finalització: 2009
C. Estarellas; M. C. Rotger; M. Capó; D. Quiñonero; A. Frontera; A. Costa; P. M. Deyà. "O14, libro de comunicaciones".
- 33** **Títol del treball:** Synthesis, crystal structure and theoretical studies of N¹-substituted-5-X-uracil (X = F,H) ligands
Nom del congrés: Reunión Científica Bioinorgánica 2009 (15-18 Julio).
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Puigderros (Llucmajor-Mallorca), Espanya
Data de celebració: 2009
Data de finalització: 2009
Barceló-Oliver, M.; Terrón, A.; García-Raso, A.; Molins, E.; Mata, I.; Estarellas, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M. "Libro de actas del congreso; DL: PM 1364-2009; póster P5; página 33".



- 34** **Títol del treball:** Theoretical ab initio study of the interplay between hydrogen bonding, cation-pi and pi-pi interactions.
Nom del congrés: Reunión científica bioinorgánica 2009
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Puigderros, Espanya
Data de celebració: 2009
Data de finalització: 2009
Estarellas, C.; Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "P27, libro de comunicaciones".
- 35** **Títol del treball:** Estudio experimental y teórico de cooperatividad entre interacciones anion-pi y CH/pi en complejos de 2,4-bis(3,5-dimetilpirazol-1-il)-s-triazina con Cu(II) y Zn(II).
Nom del congrés: Reunión científica bioinorgánica 2009
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Puigderros, Espanya
Data de celebració: 2009
Data de finalització: 2009
D. Quiñonero; F. A. Jalón; B. R. Manzano; M. P. Carranza; A. M. Rodríguez. "P53, libro de comunicaciones".
- 36** **Títol del treball:** Complejos de Iridio (III) con adeninas N6-alquilsustituidas. Influencia de la temperatura en la coordinación por N(7) o N(9)
Nom del congrés: Reunión Científica Bioinorgánica 2009 (15-18 Julio).
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Nacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Puigderros (Llucmajor-Mallorca), Espanya
Data de celebració: 2009
Data de finalització: 2009
Torres, M.; García-Raso, A.; Fiol, J.J.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M.; Lagos, Y.; Albertí, F.M.; Barceló-Oliver, M.; Molins, E. "Libro de actas del congreso; DL: PM 1364-2009; póster P69; página 97".
- 37** **Títol del treball:** Anion-pi interactions in biological systems
Nom del congrés: 4th International Symposium on macrocyclic and supramolecular chemistry
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Maastricht, Holanda
Data de celebració: 2009
Data de finalització: 2009
Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "Page 138, book of abstracts".
- 38** **Títol del treball:** Feasibility of anion-pi interactions with benzene: a computational study of the interplay between CH/pi and anion-pi interactions.
Nom del congrés: 4th International Symposium on macrocyclic and supramolecular chemistry
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Maastricht, Holanda
Data de celebració: 2009
Data de finalització: 2009
D. Quiñonero; A. Frontera; P. M. Deyà. "Page 269, book of abstracts".

- 39** **Títol del treball:** Very Long Range Effects: Cooperativity between Anion- π and Hydrogen Bonding Interactions.
Nom del congrés: Theoretical Chemistry: modeling reactivity from gas phase to biomolecules and solids celebrating 25 years of the theoretical chemistry network of Catalonia. Dedicated to Prof. Santiago Olivella on occasion of his 65th birthday
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Barcelona, Espanya
Data de celebració: 2009
Data de finalització: 2009
Lucas, X.; Estarellas, C.; Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M."Book of abstracts, poster 32".
- 40** **Títol del treball:** Anion- π Interactions in Riboflavin Systems
Nom del congrés: Theoretical Chemistry: modeling reactivity from gas phase to biomolecules and solids celebrating 25 years of the theoretical chemistry network of Catalonia. Dedicated to Prof. Santiago Olivella on occasion of his 65th birthday
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Barcelona, Espanya
Data de celebració: 2009
Data de finalització: 2009
Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M."Book of abstracts, poster 33".
- 41** **Títol del treball:** Cooperativity effects between Noncovalent Interactions: They are Key for Z-DNA Stability.
Nom del congrés: Theoretical Chemistry: modeling reactivity from gas phase to biomolecules and solids celebrating 25 years of the theoretical chemistry network of Catalonia. Dedicated to Prof. Santiago Olivella on occasion of his 65th birthday
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Barcelona, Espanya
Data de celebració: 2009
Data de finalització: 2009
Frontera, A.; Estarellas, C.; Escudero, D.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M."Book of abstracts, poster 36".
- 42** **Títol del treball:** Is the ethynyl group an electron-withdrawing substituent?
Nom del congrés: Theoretical chemistry: modelling reactivity from gas phase to biomolecules and solids.
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Barcelona, Espanya
Data de celebració: 2009
Data de finalització: 2009
X. Lucas; C. Estarellas; D. Quiñonero; A. Frontera; P. M. Deyà. "P. 50, book of abstracts".
- 43** **Títol del treball:** Theoretical study of the pyrrole dimer: towards a fully agreement with the experiments results.
Nom del congrés: Theoretical Chemistry: modeling reactivity from gas phase to biomolecules and solids celebrating 25 years of the theoretical chemistry network of Catalonia. Dedicated to Prof. Santiago Olivella on occasion of his 65th birthday
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participativo - Póster
Ciutat de celebració: Barcelona, Espanya



Data de celebració: 2009

Data de finalització: 2009

Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M."Book of abstracts, poster 72".

- 44** **Títol del treball:** Efectes sinèrgics entre interaccions anió- π i d'enllaç d'hidrogen
Nom del congrés: V Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Nacional
Tipus de participació: Participatiu - Ponència oral (comunicació oral)
Ciutat de celebració: Vic (Espanya), Espanya
Data de celebració: 2008
Data de finalització: 2008
Escudero, D.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P. M."Book of Abstracts, Pág. 37".

- 45** **Títol del treball:** (Presidència de sessió)
Nom del congrés: V Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Nacional
Tipus de participació: Participatiu - Otros
Ciutat de celebració: Vic, Espanya
Data de celebració: 2008
Data de finalització: 2008
David Quiñonero. "Book of abstracts p. 11".

- 46** **Títol del treball:** Interplay Between Cation- Π and hydrogen Bonding Interactions
Nom del congrés: Conference on Supramolecular Approaches to Catalysis (SUPRACAT)
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participatiu - Pòster
Ciutat de celebració: Barcelona, Espanya
Data de celebració: 2008
Data de finalització: 2008
Antonio Frontera; Daniel Escudero; David Quiñonero; Pere M. Deyà. "Book of abstracts P31".

- 47** **Títol del treball:** A theoretical study of mellitic acid anhydride derivatives as building blocks for the molecular recognition of anions by means of anion- π interactions
Nom del congrés: Conference on Supramolecular Approaches to Catalysis
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participatiu - Pòster
Ciutat de celebració: Barcelona, Espanya
Data de celebració: 2008
Data de finalització: 2008
Estarellas, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Morey, J.; Deyà, P.M."Book of Abstracts, Barcelona 2 -5 March 2008, P34".

- 48** **Títol del treball:** Dimeric and Trimeric Pyromellitimides as receptors for anions by means of anion- π interaction
Nom del congrés: Conference on Supramolecular Approaches to Catalysis
Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional
Tipus de participació: Participatiu - Pòster
Ciutat de celebració: Barcelona, Espanya
Data de celebració: 2008
Data de finalització: 2008



Estarellas, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Morey, J.; Deyà, P. M. "Book of Abstracts, Barcelona 2 -5 March 2008, P39".

- 49** **Títol del treball:** A Novel Anion- π Interaction in Biological Systems: Interplay Between Anion- π and C-H/ π Interactions

Nom del congrés: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2008)

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

Ciutat de celebració: Palma de Mallorca, Espanya

Data de celebració: 2008

Data de finalització: 2008

Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M. "Book of Abstracts, OP7, pagina 39."

- 50** **Títol del treball:** MP2 study of edge-to-face aromatic interactions between pyridine moieties and benzene.

Nom del congrés: 6th Congres on electronic structure: principles and applications (ESPA 2008)

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participativo - Póster

Ciutat de celebració: Palma de Mallorca, Espanya

Data de celebració: 2008

Data de finalització: 2008

Escudero, D.; Frontera, A.; Estarellas, C.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "Book of Abstracts, Pág. 106".

- 51** **Títol del treball:** MP2 Study of the Dual sigma/ π Anion Binding Affinity of Fluorinated Phthallic Acid Anhydrides

Nom del congrés: Electronic and Structure: Principles and Applications (ESPA)

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participativo - Póster

Ciutat de celebració: Palma de Mallorca, Espanya

Data de celebració: 2008

Data de finalització: 2008

Estarellas, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Morey, J.; Deyà, P.M. "Book of Abstracts, P55, pagina 107."

- 52** **Títol del treball:** Study of interaction in 1,5,8,12-tetrakis(2-pyrimidil)1,5,8,12-dodecane and its Ag(I) complexes

Nom del congrés: 4th EuCheMS Conference on NITROGEN LIGANDS in Coordination Chemistry, Metal-Organic Chemistry, Bioinorganic Chemistry & Homogeneous Catalysis

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participativo - Póster

Ciutat de celebració: Garmisch-Partenkirchen, Alemanya

Data de celebració: 2008

Data de finalització: 2008

Albertí, F.M.; García-Raso, A.; Fiol, J.J.; Tasada, A.; Barceló-Oliver, M.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M.; Molins, E. "Libro de Resúmenes del Congreso. Resumen P-2."

- 53** **Títol del treball:** Estudio Teórico de Sinergias en Enlaces de Hidrógeno no Convencionales en Complejos con Sistemas Aromáticos

Nom del congrés: XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Nacional

Tipus de participació: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

Ciutat de celebració: Toledo, Espanya

Data de celebració: 2007

Data de finalització: 2007



Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P. M. "Book of Abstracts Tomo I, Pág. 121".

- 54** **Títol del treball:** Mapas de Energía de Polarización Inducida (IPE): Una Nueva Herramienta para Predecir Geometrías de Complejos Anión- π

Nom del congrés: XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Nacional

Tipus de participació: Participativo - Póster

Ciutat de celebració: Toledo, Espanya

Data de celebració: 2007

Data de finalització: 2007

Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P. M. "Book of Abstracts Tomo II, Pág. 397".

- 55** **Títol del treball:** Modelització i Síntesi de Macrocicles per al reconeixament Quiral de Pèptids

Nom del congrés: IV Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Nacional

Tipus de participació: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

Ciutat de celebració: Lleida, Espanya

Data de celebració: 2006

Data de finalització: 2006

Ballester, P.; Castilla, A.M.; Costa, A.; Deyà, P.M.; Quiñonero, D. i Frontera, A. "Llibre de resums pag. 73".

- 56** **Títol del treball:** Strong substituent effects in [n.n]paracyclophane complexes with cations.

Nom del congrés: Structure: Principles and Applications (ESPA 2006)

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participativo - Póster

Ciutat de celebració: Santiago de Compostela, Espanya

Data de celebració: 2006

Data de finalització: 2006

Frontera, A.; * Quiñonero, D.; Garau, C. i Deyà, P.M. "Book of Abstracts P-38".

- 57** **Títol del treball:** Synergic effects between cation- π , anion- π and π - π interactions.

Nom del congrés: Structure: Principles and Applications (ESPA 2006)

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participativo - Póster

Ciutat de celebració: Santiago de Compostela, Espanya

Data de celebració: 2006

Data de finalització: 2006

David Quiñonero; * Antonio Frontera; Carolina Garau; Pere M. Deyà. "Book of Abstracts P-39".

- 58** **Títol del treball:** Interplay between catión- π , anión- π and π - π interactions

Nom del congrés: III simposium de Investigadores Jóvenes RSEQ-SIGMA-ALDRICH

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

Ciutat de celebració: Tarragona, Espanya

Data de celebració: 2006

Data de finalització: 2006

Quiñonero, D.; Frontera A.; Garau, C. i Deyà, P.M. "Book of Abstracts Pag. 42".

- 59** **Títol del treball:** Estudio teórico y cristalográfico de efectos sinérgicos entre interacciones catión- π , anión- π y π - π

Nom del congrés: III Reunión de Química Orgánica del Mediterráneo (REQOMED3)



Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Nacional
Tipus de participació: Participatiu - Ponència invitada/ Keynote
Ciutat de celebració: Castellón, Espanya
Data de celebració: 2006
Data de finalització: 2006
Frontera, A.; Quiñonero, D.; Garau, C. i Deyà, P.M. "Book of Abstracts p. C18".

60 Títol del treball: Recent Progress in Computational Studies of Transition Metal-Catalyzed Element-Element Activation and Addition to Unsaturated Organic Substrates.

Nom del congrés: World Association of Theoretically Oriented Chemists. WATOC 2005

Tipus d'esdeveniment: Congrés **Àmbit del congrés:** Internacional

Tipus de participació: Participatiu - Ponència invitada/ Keynote

Ciutat de celebració: Ciudad del Cabo, República de Sud-àfrica

Data de celebració: 2005

Data de finalització: 2005

K. Morokuma; * D. G. Musaev; V. P. Ananikov; J. M. Gonzales; I. V. Khavrutskii; D. Quiñonero. "Book of Abstracts P.105".

61 Títol del treball: Cation induced face-to-face stacking interactions in benzene-benzene systems

Nom del congrés: 7th World congress of theoretically oriented chemists (WATOC'05)

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participatiu - Pòster

Ciutat de celebració: Ciudad del Cabo, República de Sud-àfrica

Data de celebració: 2005

Data de finalització: 2005

C. Garau; A. Frontera; D. Quiñonero; P. M. Deyà. "Book of abstracts, p. 165".

62 Títol del treball: Analytical second derivatives, parameterization, and improvement of the DFTB (Density Functional Tight Binding) method.

Nom del congrés: 229th ACS National Meeting

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participatiu - Otros

Ciutat de celebració: San Diego, CA, Estats Units d'Amèrica

Data de celebració: 2005

Data de finalització: 2005

Henryk A. Witek; Guishan Zheng; Djamaladdin G. Musaev; Stephan Irle; David Quinonero; Marcus Elstner; Keiji Morokuma. "COMP 300".

63 Títol del treball: On the reliability of MPWB1K exchange-correlation functional to describe the anion- π interactions

Nom del congrés: XXXI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Quitel 2005

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participatiu - Pòster

Ciutat de celebració: Isla Margarita. Venezuela., Veneçuela

Data de celebració: 2005

Data de finalització: 2005

Garau, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M.; Russo, N. "Book of Abstracts P II-20".

64 Títol del treball: Exploring new binding units for the molecular recognition of anions

Nom del congrés: European Science Foundation Research Conference on Supramolecular Chemistry: Molecular Architectures and Systems



Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participatiu - Pòster

Ciutat de celebració: Obernai (Strasbourg), França

Data de celebració: 2005

Data de finalització: 2005

D. Quiñonero; C. Garau; A. Frontera; P. Ballester; A. Costa; P. M. Deyà. "Posters number 28 and 37".

- 65** **Títol del treball:** Computational Studies of the O-O Bond Activation and Olefin Epoxidation Catalyzed by Fe-BPMEN-Complexes.

Nom del congrés: X International Conference on Theoretical Aspect of Catalysis

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participatiu - Ponencia invitada/ Keynote

Ciutat de celebració: Tropea, Itàlia

Data de celebració: 2004

Data de finalització: 2004

David Quiñonero; Djamaladdin G. Musaev; Keiji Morokuma*.

- 66** **Títol del treball:** Unexpected Binding Affinity of [2.2]Paracyclophane to Cations

Nom del congrés: Internet Electronic Conference of Molecular Design 2004 (IECMD 2004)

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participatiu - Pòster

Ciutat de celebració: Galvestone, Estats Units d'Amèrica

Data de celebració: 2004

Data de finalització: 2004

Antonio Frontera; * Carolina Garau; David Quiñonero; Pablo Ballester; Antoni Costa; Pere M. Deyà. "Presentation 26".

- 67** **Títol del treball:** Lithium Diffusion in Single Walled Carbon Nanotubes

Nom del congrés: EUREGIONALE 2003

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participatiu - Pòster

Ciutat de celebració: Dresden, Alemanya

Data de celebració: 2003

Data de finalització: 2003

Garau, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P. M. "Book of abstracts p. 87".

- 68** **Títol del treball:** Non-Heme Fe Catalysts for Olefin Oxidation: a DFT Study on their Spin States

Nom del congrés: Southeast Theoretical Chemistry Association (SETCA)

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Nacional

Tipus de participació: Participatiu - Ponencia oral (comunicación oral)

Ciutat de celebració: Clemson, Estats Units d'Amèrica

Data de celebració: 2003

Data de finalització: 2003

David Quiñonero; * Djamaladdin G. Musaev; Keiji Morokuma.

- 69** **Títol del treball:** Computational Studies of the O-O Bond Activation and Olefin Epoxidation Catalyzed by Mn-Salen and Fe-BPMEN-Complexes.

Nom del congrés: Computational Modelling of Catalysis

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participatiu - Ponencia invitada/ Keynote

Ciutat de celebració: Mülheim an der Ruhr, Alemanya



Data de celebració: 2003

Data de finalització: 2003

David Quiñonero; Ilja V. Khavrutskii; Djamaladdin G. Musaev; Keiji Morokuma*.

70 **Títol del treball:** Anion- π Interactions, Do They Exist?

Nom del congrés: II Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Nacional

Tipus de participació: Participatiu - Ponència oral (comunicació oral)

Ciutat de celebració: Girona, Espanya

Data de celebració: 2002

Data de finalització: 2002

David Quiñonero; * Carolina Garau; Antonio Frontera; Pere M. Deyà. "Book of Abstracts page 42".

71 **Títol del treball:** Anion- π interactions

Nom del congrés: 6th World Congress of Theoretically Oriented Chemists. WATOC 02.

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participatiu - Pòster

Ciutat de celebració: Lugano, Suïssa

Data de celebració: 2002

Data de finalització: 2002

Garau, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P. M. "Book of abstracts PB268".

72 **Títol del treball:** Theoretical Study of the Aromaticity of Squaramide and Oxocarbons

Nom del congrés: I Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Nacional

Tipus de participació: Participatiu - Ponència oral (comunicació oral)

Ciutat de celebració: Sitges, Espanya

Data de celebració: 2000

Data de finalització: 2000

David Quiñonero; Antonio Frontera; * Pere M. Deyà. "Book of Abstracts page 41".

73 **Títol del treball:** A Theoretical Computation of Aromaticity in Squaramide

Nom del congrés: World Congress of Theoretically Oriented Chemists. WATOC 99

Tipus d'esdeveniment: Congrés

Àmbit del congrés: Internacional

Tipus de participació: Participatiu - Pòster

Ciutat de celebració: Londres, Regne Unit

Data de celebració: 1999

Data de finalització: 1999

Pere M. Deyà; Antonio Frontera; David Quiñonero*. "Book of Abstracts P.395".

Treballs presentats en jornades, seminaris, tallers de treball i/o cursos nacionals o internacionals

Títol del treball: La interacció anión- π en la Química Supramolecular: Pasado, presente y futuro

Intervenció per: Ponent

Ciutat de celebració: Burgos, Espanya

Data de celebració: 07/06/2011

Data de finalització: 07/06/2011

Gestió d'R+D+i i participació en comitès científics

Organització d'activitats d'R+D+I

Títol de l'activitat: Setena trobada de joves investigadors dels Països Catalans

Tipus d'activitat: Congrés

Data d'inici: 2012

Altres mèrits

Estades en centres d'R+D+I públics o privats

- Entitat de realització:** Cherry L. Emerson Center for Scientific Computation, Emory University
Ciutat de l'entitat de realització: Atlanta, Georgia, Estats Units d'Amèrica
Data d'inici: 2008 **Durada:** 1 mes
Objectiu de l'estada: Altres (especificau-ho) - Emerson Center Visiting Fellowship award
Tasques contrastables: Estudios teórico de interacciones anión-pi en heterociclos ligados a metales de transición.
- Entitat de realització:** Cherry L. Emerson Center for Scientific Computation and Department of Chemistry, Emory University
Ciutat de l'entitat de realització: Atlanta, Georgia, Estats Units d'Amèrica
Data d'inici: 2006 **Durada:** 1 mes
Objectiu de l'estada: Altres (especificau-ho) - Emerson Center Visiting Fellowship award
Tasques contrastables: Estudios teóricos en nanotubos de carbono dopados
- Entitat de realització:** Cherry L. Emerson Center for Scientific Computation and Department of Chemistry, Emory University
Ciutat de l'entitat de realització: Atlanta, Georgia, Estats Units d'Amèrica
Data d'inici: 2002 **Durada:** 2 anys
Objectiu de l'estada: Postdoctoral
Tasques contrastables: Estudios teóricos en compuestos de metales de transición

Resum d'altres mèrits

- Descripció del mèrit:** Línies de recerca: Polioxometalatos (POMs) como especies oxidantes de olefinas por medio de O₂.; 2003 --
Entitat que acredita: Cherry L. Emerson Center for Scientific Computation and Department of Chemistry, Emory University
Data de la concessió: 2003
- Descripció del mèrit:** Línies de recerca: Complejos de Circonio como Catalizadores en la Fijación de la molécula de Dinitrógeno.; 2003 --
Entitat que acredita: Cherry L. Emerson Center for Scientific Computation and Department of Chemistry, Emory University
Data de la concessió: 2003



- 3** **Descripció del mèrit:** Línies de recerca: Nanotubos de Carbono: Difusión de Litio a través de sus Pared; 2003 --
Entitat que acredita: Universidad de las Islas Baleares
Data de la concessió: 2003
- 4** **Descripció del mèrit:** Línies de recerca: Estudios Teóricos de los complejos [(BPMEN)Fe(II)(NCCH₃)₂]²⁺, Precursor del Catalizador de Hierro Para la Epoxidación y Cis-Hidroxilación de Olefinas.; 2002 --
Entitat que acredita: Cherry L. Emerson Center for Scientific Computation and Department of Chemistry, Emory University
Data de la concessió: 2002
- 5** **Descripció del mèrit:** Línies de recerca: Sales de Manganese(II) Como Catalizadores de la Reacción de Epoxidación de Olefinas en Medio Acuoso.; 2002 --
Entitat que acredita: Cherry L. Emerson Center for Scientific Computation and Department of Chemistry, Emory University
Data de la concessió: 2002
- 6** **Descripció del mèrit:** Línies de recerca: Interacciones catión y anión- π ; 2001 --
Entitat que acredita: Universidad de las Islas Baleares
Data de la concessió: 2001
- 7** **Descripció del mèrit:** Línies de recerca: Estudio teórico del autoensamblaje de porfirinas de zinc para construir unidades macrocíclicas con ligandos nitrogenados.; 1999 --
Entitat que acredita: Universidad de las Islas Baleares
Data de la concessió: 1999
- 8** **Descripció del mèrit:** Línies de recerca: Estudio Teórico del Reconocimiento Molecular Mediante Receptores Tripodales.; 1996 --
Entitat que acredita: Universidad de las Islas Baleares
Data de la concessió: 1996
- 9** **Descripció del mèrit:** Premio extraordinario de licenciatura en Ciencias Químicas correspondiente al año académico 1996-97.
- 10** **Descripció del mèrit:** Participante en la Postgraduate Winter School on Organic Reactivity (WISOR VII) en Bressanone (Italia), 9-17 de enero, 1998.
- 11** **Descripció del mèrit:** Investigador contratado doctor al amparo del Programa Juan de la Cierva 2004.
- 12** **Descripció del mèrit:** Colaborador como miembro de la UIB en la "4a Fira de la Ciencia de les Illes Balears" tomando parte en las actividades interactivas, expositivas y divulgativas de la ciencia y de sus aplicaciones tecnológicas, llevadas a cabo en Mahón los días 17, 18 y 19 de marzo de 2005.
- 13** **Descripció del mèrit:** Colaborador como miembro de la UIB en la "4a Fira de la Ciencia de les Illes Balears" tomando parte en las actividades interactivas, expositivas y divulgativas de la ciencia y de sus aplicaciones tecnológicas, llevadas a cabo en Palma de Mallorca los días 28, 29 y 30 de abril de 2005.

- 14 Descripció del mèrit:** Emerson Center Visiting Fellowship Award 2006-2007.
- 15 Descripció del mèrit:** Colaborador como miembro de la UIB en la "6ª Fira de la Ciència de les Illes Balears" tomando parte en las actividades interactivas, expositivas y divulgativas de la ciencia y des sus aplicaciones tecnológicas, llevadas a cabo en Mahón los días 8, 9 y 10 de marzo de 2007.
- 16 Descripció del mèrit:** Colaborador como miembro de la UIB en la "6ª Fira de la Ciència de les Illes Balears" tomando parte en las actividades interactivas, expositivas y divulgativas de la ciencia y des sus aplicaciones tecnológicas, llevadas a cabo en Palma de Mallorca los días 29, 30 y 31 de marzo de 2007.
- 17 Descripció del mèrit:** Certificación de la actividad docente e investigadora para la contratación de profesorado universitario en la figura de profesor ayudante doctor por la agencia de calidad universitaria de las Islas Baleares (AQUIB) en noviembre de 2006.
- 18 Descripció del mèrit:** Colaborador como miembro de la UIB en la "7ª Fira de la Ciència de les Illes Balears" tomando parte durante 15 horas en las actividades interactivas, expositivas y divulgativas de la ciencia y de sus aplicaciones tecnológicas, llevadas a cabo en Palma de Mallorca los días 17, 18 y 19 de abril de 2008.
- 19 Descripció del mèrit:** Certificación de la actividad docente e investigadora para la contratación de profesorado universitario en la figura de profesor contratado doctor por la agencia nacional de evaluacion de la calidad y acreditacion (ANECA) en septiembre de 2008.
- 20 Descripció del mèrit:** Emerson Center Visiting Fellowship Award 2008-2009.
- 21 Descripció del mèrit:** Certificación por la Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva (ANEP) de la evaluación positiva de los requisitos de calidad de la producción y actividad científico-tecnológica que implican una trayectoria investigadora destacada a efectos del Programa de Incentivación de la Incorporación e Intensificación de la Actividad Investigadora (Programa I3) en diciembre de 2013.
- 22 Descripció del mèrit:** Certificación de acreditación nacional para concurrir a concursos de acceso al cuerpo de Profesores Titulares de Universidad por la agencia nacional de evaluacion de la calidad y acreditacion (ANECA) en junio de 2014.