



ANTONIO FRONTERA BECCARIA

Generado desde: Universitat de les Illes Balears

Fecha del documento: 13/10/2021

v 1.4.0

15dc1c9cdc2794239db97cc968764bc9

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/>

Resumen libre del currículum

Descripción breve de la trayectoria científica, los principales logros científico-técnicos obtenidos, los intereses y objetivos científico-técnicos a medio/largo plazo de la línea de investigación. Incluye también otros aspectos o peculiaridades importantes.

-

I finished my undergraduate period (5 year) at the Universidad de las Islas Baleares (UIB) in 1990. After that I started my PhD (FPU fellowship) at the same University under the guidance of Profs. J. M. Saá and Pere M. Deyà. The thesis work was both experimental (lithiation of polyhydric compounds) and theoretical (mechanism of organic reactions) using a computational cluster. As PhD student I participated in two different projects (PB90-0040 and PB93-0424) and I published four relevant publications (JACS 1992, 114, 9093; JOC 1992, 57, 6731; JACS 1995, 117, 1105; JOC 1996, 61, 5194). After completion of my PhD, I moved to Yale University (FPU postdoctoral fellowship) under the guidance of Profesor W. L. Jorgensen. In this postdoctoral (2 years) period I participated in the parametrization of the OPLS force field for carbohydrates, that was not available at that time. After two years of work the manuscript was finally published in JCC, 1997, 18, 1955 and it has been cited 523 times (WoS). After finishing my postdoctoral fellowship, I returned to Spain (UIB) with a postdoctoral contract (MEC program for the re-incorporation of doctors, from 1998 to 2003). During that time, I published 22 articles as corresponding author, being the most relevant one: ACIE, 2002, 41, 3389, cited by 572. In that period, I participated in two national projects PB98-0129 and BQU2002-04651). After that, I obtained a "Ramón y Cajal" contract and project (2004-2006) to investigate carbon nanotubes and their possible utilization in the rechargeable lithium batteries field. Moreover, I also participated in the supramolecular chemistry project CTQ2005-08989-C02-01/BQU. During that time I published 28 articles as corresponding author. In 2007 I was promoted to "profesor contratado doctor" (until 2010) and I participated in two national projects: CTQ2008-00841 and Consolider Ingenio CSD2010-00065). From 2007 to 2010 I published 65 articles as corresponding author related to Supramolecular Chemistry and weak interactions. In march 2011, I was promoted to "Profesor Titular de Universidad" and 7 years later (march 2018) to "Catedrático de Universidad". In this last period as professor and full professor I have participated in five national projects: CONSOLIDER CSD2010-00065, CTQ2011-27152, CTQ2014-57393-C2-1-P (co-IP), CTQ2017-85821-R (IP) and RED2018-102331-T (coordinator).

Collaborations: I have been very active establishing national and international collaborations. The international ones, I would like to highlight those with Prof. Dr. Rainer Streubel, U. Bonn, Prof. Dr. Jan J. Weigand, U. Dresden in Germany; Dr. Tiddo J. Mooibroek, U. Amsterdam, Netherlands; Prof. Dr. Stefan Matile and Prof. Fabien Cougnon, U. Geneva (Switzerland); Prof. Vadim Yu. Kukushkin, Saint Petersburg State University, Russia, and Prof. Kari Rissanen, U. de University of Jyväskylä (Finlandia), Prof. Giuseppe Resnati (Italy).

ANTONIO FRONTERA BECCARIA

Apellidos: **FRONTERA BECCARIA**
Nombre: **ANTONIO**
DNI: **43045411Z**
ORCID: **0000-0001-7840-2139**
ResearcherID: **G-4517-2010**
ScopusID: **7004015277**
Fecha de nacimiento: **04/07/1967**
Sexo: **Hombre**
Nacionalidad: **España**
País de nacimiento: **España**
Ciudad de nacimiento: **Palma (BALEARES)**
Dirección de contacto: **Carretera de Valldemossa, km 7.5**
Código postal: **07122**
País de contacto: **España**
Ciudad de contacto: **Palma**
Teléfono fijo: **971173262 -**
Fax: **971173426**
Correo electrónico: **toni.frontera@uib.es**

Situación profesional actual

Entidad empleadora: Universidad de las Islas Baleares

Departamento: Facultad de Ciencias, Departamento de Química

Categoría profesional: Catedrático de universidad

Fecha de inicio: 27/03/2018

Modalidad de contrato: Funcionario/a

Régimen de dedicación: Tiempo completo

Primaria (Cód. Unesco): 230600 - Química orgánica

Funciones desempeñadas: CUMPLIMENTE LA DEDICACIÓN PROFESIONAL EN EL APARTADO DE TEXTOS DEL CURRÍCULUM

Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
1	Universidad de las Islas Baleares	Profesor Contratado Doctor	20/12/2006
2	Universidad de las Islas Baleares	Contratado 'Ramón y Cajal	19/11/2003
3	Universidad de las Islas Baleares	Profesor asociado	01/10/1998
4	Universidad de las Islas Baleares	Contrat. de Investigación	01/04/1997
5	Yale University (USA)	Becario FPI Extranjero	01/01/1995
6	Universidad de las Islas Baleares	Becario FPU	01/01/1990



Entidad empleadora: Universidad de las Islas Baleares

Categoría profesional: Profesor Contratado Doctor

Fecha de inicio: 20/12/2006

Duración: 4 años - 3 meses - 10 días

2 Entidad empleadora: Universidad de las Islas Baleares

Categoría profesional: Contratado 'Ramón y Cajal

Fecha de inicio: 19/11/2003

Duración: 3 años - 1 mes - 1 día

3 Entidad empleadora: Universidad de las Islas Baleares

Categoría profesional: Profesor asociado

Fecha de inicio: 01/10/1998

Duración: 5 años - 6 meses

4 Entidad empleadora: Universidad de las Islas Baleares

Categoría profesional: Contrat. de Investigación

Fecha de inicio: 01/04/1997

Duración: 6 años - 4 meses

5 Entidad empleadora: Yale University (USA)

Categoría profesional: Becario FPI Extranjero

Fecha de inicio: 01/01/1995

Duración: 2 años

6 Entidad empleadora: Universidad de las Islas Baleares

Categoría profesional: Becario FPU

Fecha de inicio: 01/01/1990

Duración: 5 años



Formación académica recibida

Titulación universitaria

Estudios de 1º y 2º ciclo, y antiguos ciclos (Licenciados, Diplomados, Ingenieros Superiores, Ingenieros Técnicos, Arquitectos)

Titulación universitaria: Diplomatura / Licenciatura / Grado

Nombre del título: Ciencias Químicas

Entidad de titulación: Universidad de las Islas Baleares

Fecha de titulación: 12/1990

Doctorados

Programa de doctorado: Ciencias Químicas

Entidad de titulación: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de titulación: 05/12/1994

Actividad docente

Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

- Título del trabajo:** On the importance of σ - π -hole interactions in chemistry and biochemistry
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Antonio Bauzá Riera
Calificación obtenida: Sobresaliente cum laude
Fecha de defensa: 2017
- Título del trabajo:** Theoretical and experimental study of cooperativity effects in noncovalent interactions
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Carolina Estarellas Martin
Calificación obtenida: Sobresaliente cum laude y P.E.
Fecha de defensa: 2012
- Título del trabajo:** Estudio teórico de las interacciones entre aniones y sistemas π
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Entidad de realización: Illes Balears
Ciudad entidad realización: España



Alumno/a: Garau Rosselló, Carolina

Calificación obtenida: Sobresaliente cum laude y P.E.

Fecha de defensa: 2006

- 4 Título del trabajo:** Estudio teórico del reconocimiento molecular de cationes amonio mediante receptores basados en unidades de escuaramida
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Quiñonero Santiago, David
Calificación obtenida: Apto cum laude
Fecha de defensa: 2001

Experiencia científica y tecnológica

Actividad científica o tecnológica

Proyectos de I+D+i financiados en convocatorias competitivas de Administraciones o entidades públicas y privadas

- 1 Nombre del proyecto:** Diseño y desarrollo de materiales supramoleculares funcionales (FUSUMA)
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Frontera Beccaria; María del Carmen Rotger Pons
Nº de investigadores/as: 10
Entidad/es financiadora/s: MINISTERI DE CIÈNCIA I INNOVACIO **Tipo de entidad:** Otros organismos
Ciudad entidad financiadora: MADRID, España
Cód. según financiadora: PID2020-115637GB-I00
Fecha de inicio-fin: 01/09/2021 - 31/08/2024 **Duración:** 3 años
Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears
Cuántía total: 121.000 €
- 2 Nombre del proyecto:** Materiales Supramoleculares Funcionales
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Frontera Beccaria
Nº de investigadores/as: 14
Entidad/es financiadora/s: Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades **Tipo de entidad:** Ministerios
Ciudad entidad financiadora: España
Cód. según financiadora: RED2018-102331-T
Fecha de inicio-fin: 01/01/2020 - 31/12/2021 **Duración:** 2 años
Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears



Cuantía total: 20.000 €

- 3 Nombre del proyecto:** Aproximaciones supramoleculares para el desarrollo de materiales funcionales con aplicaciones biomédicas

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Frontera Beccaria; María del Carmen Rotger Pons

Nº de investigadores/as: 15

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Economía, Industria y Competitividad **Tipo de entidad:** Ministerios

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: CTQ2017-85821-R

Fecha de inicio-fin: 01/01/2018 - 30/09/2021 **Duración:** 3 años - 9 meses

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 105.270 €

- 4 Nombre del proyecto:** Adquisición de un equipo de dispersión de rayos X de bajo ángulo (SAXS)

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Costa Torres

Nº de investigadores/as: 23

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades **Tipo de entidad:** Ministerios

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: EQC2018-004206-P

Fecha de inicio-fin: 01/01/2018 - 31/12/2020 **Duración:** 3 años

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 599.500 €

- 5 Nombre del proyecto:** Estudios de química supramolecular fundamental y aplicada con orientación biomédica. Acrónimo: SUPRABIO2014

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Costa Torres; Antonio Frontera Beccaria

Nº de investigadores/as: 11

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO) **Tipo de entidad:** Ministerios

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: CTQ2014-57393-C2-1-P

Fecha de inicio-fin: 01/01/2015 - 30/06/2018 **Duración:** 3 años - 6 meses

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 108.900 €

- 6** **Nombre del proyecto:** Supramolecular Chemistry Applied to the Design, Synthesis and Evaluation of Bioactive Compounds of Antiinflammatory, Antitumour or Antiparasitic Action
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Costa Torres
Nº de investigadores/as: 2
Entidad/es financiadora/s: Ministerio de Ciencia e Innovación **Tipo de entidad:** Ministerios
Ciudad entidad financiadora: España
Cód. según financiadora: CSD2010 00065
Fecha de inicio-fin: 01/01/2011 - 26/12/2016 **Duración:** 5 años - 11 meses - 26 días
Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears
Cuantía total: 434.811,2 €
- 7** **Nombre del proyecto:** Estudios relativos a la química supramolecular de sistemas aromáticos y de base esquaramida: aplicaciones biológicas y tecnológicas
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Costa Torres
Nº de investigadores/as: 12
Entidad/es financiadora/s: Ministerio de Ciencia e Innovación **Tipo de entidad:** Ministerios
Ciudad entidad financiadora: España
Cód. según financiadora: CTQ2011 27152
Fecha de inicio-fin: 01/01/2012 - 31/12/2014 **Duración:** 3 años
Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears
Cuantía total: 199.650 €
- 8** **Nombre del proyecto:** Química supramolecular
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Costa Torres
Nº de investigadores/as: 14
Entidad/es financiadora/s: Conselleria d'Innovació, Interior i Justícia **Tipo de entidad:** Administraciones Públicas
Ciudad entidad financiadora: España
Cód. según financiadora: 23/2011
Fecha de inicio-fin: 01/12/2011 - 30/11/2014 **Duración:** 3 años
Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears
Cuantía total: 36.000 €
- 9** **Nombre del proyecto:** Estudios relativos a estructuras supramoleculares: desde la teoría y la modelización a la detección y evaluación de la actividad biológica
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Costa Torres



Nº de investigadores/as: 9

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Educación y Ciencia

Tipo de entidad: Ministerios

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: CTQ2008 00841

Fecha de inicio-fin: 01/01/2009 - 31/12/2011

Duración: 3 años

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 192.269 €

- 10 Nombre del proyecto:** Adquisició d'un equip per desenvolupar recerca en 'Nanotecnologia aplicada a l'emmagatzematge de combustibles no contaminants'

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Frontera Beccaria

Nº de investigadores/as: 1

Entidad/es financiadora/s:

Conselleria d'Innovació, Interior i Justícia

Tipo de entidad: Administraciones Públicas

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: AAEE0177 09

Fecha de inicio-fin: 01/04/2011 - 15/10/2011

Duración: 6 meses - 15 días

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 7.000 €

- 11 Nombre del proyecto:** Estudio experimental y teórico de unidades básicas viables para la construcción de receptores de aniones tóxicos frecuentemente presentes en el medio ambiente

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): David Quiñonero Santiago

Nº de investigadores/as: 5

Entidad/es financiadora/s:

Conselleria d'Economia, Hisenda i Innovació. Govern de les Illes Balears

Tipo de entidad: Administraciones Públicas

Ciudad entidad financiadora: España

Fecha de inicio-fin: 01/01/2007 - 31/12/2008

Duración: 2 años

Entidad/es participante/s: Sense especificar

Cuantía total: 35.000 €

- 12 Nombre del proyecto:** Diseño, síntesis y evaluación de estructuras supramoleculares funcionales: sensores, receptores y dispositivos moleculares.

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Pere Maria Deyà Serra

Nº de investigadores/as: 10

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Educación y Ciencia

Tipo de entidad: Ministerios

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: CTQ2005-08989-C02-01/BQU



Fecha de inicio-fin: 15/10/2005 - 14/10/2008

Duración: 3 años

Entidad/es participante/s: Sense especificar

Cuantía total: 178.500 €

13 Nombre del proyecto: Constitució d'un grup interdisciplinari per fer investigació de cèl·lules solars

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antoni Frontera Beccaria

Nº de investigadores/as: 7

Entidad/es financiadora/s:

Conselleria d'Innovació i Tecnologia

Tipo de entidad: Otros organismos

Ciudad entidad financiadora: Desconocido

Fecha de inicio-fin: 2005 - 2006

Duración: 1 año - 1 día

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 1.500 €

14 Nombre del proyecto: Constitució d'un grup interdisciplinari per fer investigació de cèl·lules solars

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Frontera Beccaria

Nº de investigadores/as: 1

Entidad/es financiadora/s:

Conselleria d'Economia, Hisenda i Innovació. Govern de les Illes Balears

Tipo de entidad: Administraciones Públicas

Ciudad entidad financiadora: España

Fecha de inicio-fin: 19/11/2004 - 30/09/2005

Duración: 10 meses - 12 días

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

15 Nombre del proyecto: Estudios relativos a especies supramoleculares de interés como materiales nanoestructurados y quimiosensores (supramol2002)

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Costa Torres

Nº de investigadores/as: 9

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Ciencia y Tecnología

Tipo de entidad: Ministerios

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: BQU2002-04651

Fecha de inicio-fin: 01/10/2002 - 30/09/2005

Duración: 3 años

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 156.400 €

16 Nombre del proyecto: Suport a grups competitiu

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antoni Costa Torres



Nº de investigadores/as: 7

Entidad/es financiadora/s:

Conselleria d'Innovació i Energia. Govern de les Illes Balears **Tipo de entidad:** Comunidades Autónomas

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: PRDIB-2002GC1-05

Fecha de inicio-fin: 2003 - 2005

Duración: 2 años - 1 día

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 36.000 €

17 Nombre del proyecto: Estudios relativos a especies supramoleculares de interés como materiales nanoestructurados y quimiosensores

Entidad de realización: Universidad de las Islas Balears

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antonio Costa Torres

Nº de investigadores/as: 9

Entidad/es financiadora/s:

Dirección General de Investigación Científica y Técnica

Tipo de entidad: Ministerios

Ciudad entidad financiadora: Madrid, España

Cód. según financiadora: BQU2002-04651

Fecha de inicio-fin: 2002 - 2005

Duración: 3 años - 1 día

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 156.400 €

18 Nombre del proyecto: Estudios en Química Supramolecular: Reconocimiento Molecular, Quimiosensores y autoensamblaje

Entidad de realización: Universidad de las Islas Balears

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Pau Ballester Balaguer

Nº de investigadores/as: 10

Entidad/es financiadora/s:

Dirección General de Enseñanza Superior

Tipo de entidad: Otros organismos

Ciudad entidad financiadora: Desconocido

Cód. según financiadora: PB98-0129

Fecha de inicio-fin: 1999 - 2002

Duración: 3 años - 1 día

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 66.111,33 €

19 Nombre del proyecto: Reconocimiento molecular mediante receptores tripodales, síntesis, caracterización estructural y aplicaciones.

Entidad de realización: Universidad de las Islas Balears

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Antoni Costa Torres

Nº de investigadores/as: 6

Entidad/es financiadora/s:

Tipo de entidad: Ministerios



Dirección General de Investigación Científica y Técnica

Ciudad entidad financiadora: Madrid, España

Cód. según financiadora: PB95-0341

Fecha de inicio-fin: 1996 - 1999

Duración: 3 años - 1 día

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 36.060 €

- 20** **Nombre del proyecto:** Preparación de Bases Quirales y Ácidos de Lewis Quirales para catálisis asimétrica. Síntesis de moléculas con sistemas π extendidos

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Manuel Saa Rodríguez

Nº de investigadores/as: 8

Entidad/es financiadora/s:

Dirección General de Investigación Científica y Técnica

Tipo de entidad: Ministerios

Ciudad entidad financiadora: Madrid, España

Cód. según financiadora: PB93-0424

Fecha de inicio-fin: 1994 - 1997

Duración: 3 años - 1 día

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 126.212 €

- 21** **Nombre del proyecto:** Litiación de fenoles y polifenoles. Una nueva metodología sintética

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Manuel Saa Rodríguez

Nº de investigadores/as: 5

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Educación y Cultura

Tipo de entidad: Otros organismos

Ciudad entidad financiadora: Desconocido

Cód. según financiadora: DGICYT Proyecto PB90-0040

Fecha de inicio-fin: 1991 - 1994

Duración: 3 años - 1 día

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 126.212 €

- 22** **Nombre del proyecto:** Organometálicos derivados de fenoles, su aplicación a la síntesis de quinonas

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): José Manuel Saa Rodríguez

Nº de investigadores/as: 10

Entidad/es financiadora/s:

Dirección General de Investigación Científica y Técnica

Tipo de entidad: Ministerios

Ciudad entidad financiadora: Madrid, España

Cód. según financiadora: PB87-0019

Fecha de inicio-fin: 1988 - 1991

Duración: 3 años - 1 día



Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

23 Nombre del proyecto: Categorizing Chalcogen, Pnictogen, and Tetrel Bonds, and Other Interactions Involving Groups 14-16 Elements

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Giuseppe Resnati, Pierangelo Metrangolo

Nº de investigadores/as: 11

Entidad/es financiadora/s:

International Union of Pure and Applied Chemistry

Tipo de entidad: Otros organismos

Ciudad entidad financiadora: Desconocido

Cód. según financiadora: 2016-001-2-300

Fecha de inicio: 01/07/2016

Entidad/es participante/s: Politecnico di Milano (POLIMI)

Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1** Mahmoudi, G.; Zangrando, E.; Frontera, A.; Safin, D.A. Ligand structure-driven self-assembly of Zn(NCS)₂ with a carbohydrazone ligand: A possible intermediate towards a [2 × 2] metallic grid. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1225, (Holanda): 2021. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.129269>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 4
- 2** Sharma, N.; Gupta, M.; Chowhan, B.; Frontera, A. Magnetically separable nanocatalyst (IL@CuFe₂O₄-L-Tyr-TiO₂/TiTCIL): Preparation, characterization and its applications in 1,2,3-triazole synthesis and in photodegradation of MB. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1224, (Holanda): 2021. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.129029>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 4
- 3** Maiti, M.; Thakurta, S.; Pilet, G.; Bauzá, A.; Frontera, A. Two new hydrogen-bonded supramolecular dioxo-molybdenum(VI) complexes based on acetyl-hydrazone ligands: Synthesis, crystal structure and DFT studies. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1226, (Holanda): 2021. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.129346>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 5



- 4** Das, A.; Sharma, P.; Frontera, A.; Verma, A.K.; Barcelo-Oliver, M.; Hussain, S.; Bhattacharyya, M.K. Energetically significant nitrilenitrile and unconventional CH(nitrile) interactions in pyridine based Ni(II) and Zn(II) coordination compounds: Antiproliferative evaluation and theoretical studies. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1223, (Holanda): 2021. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.129246>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 7
- 5** Ahmed, F.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Mir, M.H. Semiconducting properties of pyridyl appended linear dicarboxylate based coordination polymers: Theoretical prediction: Via DFT study. 912705 - Dalton Transactions. 50 - 1, pp. 270 - 278. (Reino Unido): 2021. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0dt03868g>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 4
- 6** Basak, T.; Gómez-García, C.J.; Gomila, R.M.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Hydrogen bond mediated intermolecular magnetic coupling in mononuclear high spin iron(III) Schiff base complexes: synthesis, structure and magnetic study with theoretical insight. 917082 - Rsc Advances. 11 - 6, pp. 3315 - 3323. (Reino Unido): 2021. ISSN 2046-2069
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ra09425k>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 5
- 7** Belmont-Sánchez, J.C.; García-Rubiño, M.E.; Frontera, A.; González-Pérez, J.M.; Castiñeiras, A.; Niclós-Gutiérrez, J.H. Bonds, -stacking and (Water)o-h/ interactions in (μ4-edta)bis(imidazole) dicopper(II) dihydrate. 918343 - Crystals. 11 - 1, pp. 1 - 15. (Suiza): 2021. ISSN 2073-4352
DOI: <https://doi.org/10.3390/cryst11010048>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
- 8** Álvarez-Vidaurre, R.; Castiñeiras, A.; Frontera, A.; García-Santos, I.; Gil, D.M.; González-Pérez, J.M.; Niclós-Gutiérrez, J.; Torres-Iglesias, R. Weak interactions in cocrystals of isoniazid with glycolic and mandelic acids. 918343 - Crystals. 11 - 4, (Suiza): 2021. ISSN 2073-4352
DOI: <https://doi.org/10.3390/cryst11040328>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
- 9** Samaniyan, M.; Mirzaei, M.; Gomila, R.M.; Eshtiagh-Hosseini, H.; Lotfian, N.; Mague, J.T.; Pour, A.N.; Frontera, A. Supramolecular network of a framework material supported by the anion-linkage of Keggin-type heteropolyoxotungstates: experimental and theoretical insights. 912705 - Dalton Transactions. 50 - 5, pp. 1895 - 1900. (Reino Unido): 2021. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0dt03891a>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8

- 10** Mahmoudi, G.; Masoudiasl, A.; Afkhami, F.A.; White, J.M.; Zangrando, E.; Gurbanov, A.V.; Frontera, A.; Safin, D.A. A new coordination polymer constructed from $\text{Pb}(\text{NO}_3)_2$ and a benzylideneisonicotinohydrazide derivative: Coordination-induced generation of a π -hole towards a tetrel-bonding stabilized structure. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1234, (Holanda): 2021. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130139>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
- 11** Pérez, H.; Di Santo, A.; Piro, O.E.; Echeverría, G.A.; Cano, A.; González, M.; Rodríguez-Hernández, J.; Ben Altabef, A.; Frontera, A.; Gil, D.M. A first exploration of isostructurality in transition metal nitroprussides: X-ray analysis, magnetic properties and DFT calculations. 912697 - Crystengcomm. 23 - 5, pp. 1158 - 1171. (Reino Unido): 2021. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ce01596b>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 10
- 12** Maity, S.; Mahapatra, P.; Ghosh, T.K.; Gomila, R.M.; Frontera, A.; Ghosh, A. Synthesis of Ni(II)-Mn(II) complexes using a new mononuclear Ni(II) complex of an unsymmetrical N_2O_3 donor ligand: structures, magnetic properties and catalytic oxidase activity. 912705 - Dalton Transactions. 50 - 13, pp. 4686 - 4699. (Reino Unido): 2021. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0dt04337k>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
- 13** Schmer, A.; Bauza, A.; Schnakenburg, G.; Frontera, A.; Streubel, R. Molecular 1,1-bifunctional mixed-valence P-P compounds, enabled through metal complexation. 912705 - Dalton Transactions. 50 - 6, pp. 2131 - 2137. (Reino Unido): 2021. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0dt04070c>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 5
- 14** Ghosh, K.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. A theoretical insight on the anion-anion interactions observed in the solid state structure of a hetero-trinuclear complex. 912697 - Crystengcomm. 23 - 6, pp. 1429 - 1438. (Reino Unido): 2021. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ce01513j>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 3
- 15** Adhikari, S.; Bhattacharjee, T.; Bhattacharjee, S.; Daniliuc, C.G.; Frontera, A.; Lopato, E.M.; Bernhard, S. Nickel(II) complexes based on dithiolate-polyamine binary ligand systems: crystal structures, hirshfeld surface analysis, theoretical study, and catalytic activity study on photocatalytic hydrogen generation. 912705 - Dalton Transactions. 50 - 16, pp. 5632 - 5643. (Reino Unido): 2021. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/d1dt00352f>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 7

- 16** Mondal, I.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. On the importance of RH_3CN tetrel bonding interactions in the solid state of a dinuclear zinc complex with a tetradentate Schiff base ligand. 912697 - Crystengcomm. 23 - 18, pp. 3391 - 3397. (Reino Unido): 2021. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ce01864c>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 3
- 17** Chetry, S.; Sharma, P.; Frontera, A.; Saha, U.; Verma, A.K.; Sarma, B.; Kalita, P.J.; Bhattacharyya, M.K. Biologically relevant and energetically significant cooperative ternary $(-)/(-)1/(-)2$ assemblies and fascinating discrete $(\text{H}_2\text{O})_{21}$ clusters in isostructural 2,5-pyridine dicarboxylato Co(II) and Zn(II) phenanthroline compounds: Antiproliferative evaluation and theoretical studies. 900672 - New Journal of Chemistry. 45 - 7, pp. 3699 - 3715. (Francia): 2021. ISSN 1144-0546
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0nj04338a>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
- 18** Yu, S.; Kumar, P.; Ward, J.S.; Frontera, A.; Rissanen, K. A nucleophilic iodine in a halogen-bonded iodonium complex manifests an unprecedented $\text{I} \cdots \text{Ag}^+$ interaction. 918910 - Chem. 7 - 4, pp. 948 - 958. (Estados Unidos de América): 2021. ISSN 2451-9294
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.chempr.2021.01.003>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 5
- 19** Ward, J.S.; Frontera, A.; Rissanen, K. Utility of Three-Coordinate Silver Complexes Toward the Formation of Iodonium Ions. 900752 - Inorganic Chemistry. 60 - 7, pp. 5383 - 5390. (Estados Unidos de América): 2021. ISSN 0020-1669
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.1c00409>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 3
- 20** Rosental, M.; Coldman, R.N.; Moro, A.J.; Angurell, I.; Gomila, R.M.; Frontera, A.; Lima, J.C.; Rodríguez, L. Using room temperature phosphorescence of gold(I) complexes for pH sensing. 910462 - Molecules. 26 - 9, (Suiza): MDPI, 2021. ISSN 1420-3049
DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules26092444>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
- 21** Baykov, S.V.; Geyl, K.K.; Ivanov, D.M.; Gomila, R.M.; Frontera, A.; Kukushkin, V.Y. Azine Steric Hindrances Switch Halogen Bonding to N-Arylation upon Interplay with π -Hole Donating Haloarene nitriles. 914021 - Chemistry-An Asian Journal. 16 - 11, pp. 1445 - 1455. (Alemania): 2021. ISSN 1861-4728
DOI: <https://doi.org/10.1002/asia.202100282>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6

- 22** Khan, S.; Dutta, T.; Cortijo, M.; González-Prieto, R.; Drew, M.G.B.; Gomila, R.M.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Phenoxido mediated antiferromagnetic and azide mediated ferromagnetic coupling in two dinuclear ferromagnetic nickel(ii) complexes with isomeric Schiff bases: a theoretical insight on the pathway of magnetic interaction. 912697 - Crystengcomm. 23 - 9, pp. 1942 - 1952. (Reino Unido): 2021. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ce01861a>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
- 23** Gomila, R.M.; Bauzá, A.; Mooibroek, T.J.; Frontera, A. Spodium bonding in five coordinated Zn(ii): a new player in crystal engineering?. 912697 - Crystengcomm. 23 - 17, pp. 3084 - 3093. (Reino Unido): 2021. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/d1ce00221j>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 4
- 24** Zia, M.; Hameed, S.; Frontera, A.; Irran, E.; Naseer, M.M. Understanding the planar conformations in diarylsubstituted heteroarenes: structural and theoretical insights. 912697 - Crystengcomm. 23 - 17, pp. 3144 - 3151. (Reino Unido): 2021. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/d1ce00354b>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 5
- 25** Karmakar, M.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Insight into the formation of H-bonds propagating the monomeric zinc complexes of a tridentate reduced Schiff base to form an infinite chain. 912697 - Crystengcomm. 23 - 9, pp. 1918 - 1928. (Reino Unido): 2021. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ce01840f>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 3
- 26** Basak, T.; Gomila, R.M.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Differentiating intramolecular spodium bonds from coordination bonds in two polynuclear zinc(ii) Schiff base complexes. 912697 - Crystengcomm. 23 - 14, pp. 2703 - 2710. (Reino Unido): 2021. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/d1ce00214g>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 4
- 27** Basak, T.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Insight into non-covalent interactions in two triamine-based mononuclear iron(iii) Schiff base complexes with special emphasis on the formation of Br halogen bonding. 912697 - Crystengcomm. 23 - 7, pp. 1578 - 1587. (Reino Unido): 2021. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ce01534b>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 3
- 28** Anyfanti, G.; Bauzá, A.; Gentiluomo, L.; Rodrigues, J.; Portalone, G.; Frontera, A.; Rissanen, K.; Puttreddy, R. Short X...N Halogen Bonds With Hexamethylenetetraamine as the Acceptor. 918579 - Frontiers In Chemistry. 9, (Suiza): 2021. ISSN 2296-2646
DOI: <https://doi.org/10.3389/fchem.2021.623595>

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 8**Tipo de soporte:** Revista

- 29** García-Rubiño, M.E.; Matilla-Hernández, A.; Frontera, A.; Lezama, L.; Niclós-Gutiérrez, J.; Choquesillo-Lazarte, D. Dicopper(II)-edta chelate as a bicephalic receptor model for a synthetic adenine nucleoside. 919296 - Pharmaceuticals. 14 - 5, (Suiza): 2021. ISSN 1424-8247

DOI: <https://doi.org/10.3390/ph14050426>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6

- 30** Thakur, S.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. An insight into the supramolecular interactions in two linear polyvanadates. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1242, (Holanda): 2021. ISSN 0022-2860

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130681>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 3

- 31** Hossain, A.; Dey, A.; Seth, S.K.; Ray, P.P.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Anion-dependent structural variations and charge transport property analysis of 4-(3-pyridyl)-4,2:6,4-terpyridinium salts. 912697 - Crystengcomm. 23 - 19, pp. 3569 - 3581. (Reino Unido): 2021. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/d1ce00248a>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 7

- 32** Ward, J.S.; Frontera, A.; Rissanen, K. Nucleophilic iodonium interactions (NIIs) in 2-coordinate iodine(I) and silver(I) complexes. 909184 - Chemical Communications. 57 - 41, pp. 5094 - 5097. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2021. ISSN 1359-7345

DOI: <https://doi.org/10.1039/d1cc01505b>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 3

- 33** Ward, J.S.; Frontera, A.; Rissanen, K. Iodonium complexes of the tertiary amines quinuclidine and 1-ethylpiperidine. 912705 - Dalton Transactions. 50 - 24, pp. 8297 - 8301. (Reino Unido): 2021. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/d1dt01437d>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 3

- 34** Zelenkov, L.E.; Eliseeva, A.A.; Baykov, S.V.; Suslonov, V.V.; Galmés, B.; Frontera, A.; Kukushkin, V.Y.; Ivanov, D.M.; Bokach, N.A. Electron belt-to-s-hole switch of noncovalently bound iodine(I) atoms in dithiocarbamate metal complexes. 918325 - Inorganic Chemistry Frontiers. 8 - 10, pp. 2505 - 2517. (Reino Unido): 2021. ISSN 2052-1553

DOI: <https://doi.org/10.1039/d1qi00314c>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 9

- 35** Guo, C.-X.; Yogendra, S.; Gomila, R.M.; Frontera, A.; Hennersdorf, F.; Steup, J.; Schwedtmann, K.; Weigand, J.J.A convenient access to fluorophosphonium triflate salts by electrophilic fluorination and anion exchange. 918325 - Inorganic Chemistry Frontiers. 8 - 11, pp. 2854 - 2864. (Reino Unido): 2021. ISSN 2052-1553
DOI: <https://doi.org/10.1039/d1qi00322d>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
- 36** Pramanik, S.; Pathak, S.; Jana, S.; Mondal, M.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. An experimental and theoretical exploration of supramolecular interactions and photoresponse properties of two Ni(II) complexes. 900672 - New Journal of Chemistry. 45 - 27, pp. 12108 - 12119. (Francia): 2021. ISSN 1144-0546
DOI: <https://doi.org/10.1039/d1nj01363g>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
- 37** Daolio, A.; Pizzi, A.; Terraneo, G.; Ursini, M.; Frontera, A.; Resnati, G. Anion-Anion Coinage Bonds: The Case of Tetrachloridoaurate. 900624 - Angewandte Chemie-International Edition. 60 - 26, pp. 14385 - 14389. (Alemania): 2021. ISSN 1433-7851
DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.202104592>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
- 38** Babashkina, M.G.; Frontera, A.; Kertman, A.V.; Saygideger, Y.; Murugavel, S.; Safin, D.A. Favipiravir: insight into the crystal structure, Hirshfeld surface analysis and computational study. 913445 - Journal Of The Iranian Chemical Society. (Irán): 2021. ISSN 1735-207X
DOI: <https://doi.org/10.1007/s13738-021-02285-x>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
- 39** Hazari, A.; Gomila, R.M.; Frontera, A.; Drew, M.G.B.; Ghosh, A. Change in molecular shapes of the trinuclear CuII 2ZnII complexes on Schiff base reduction: structural and theoretical investigations. 912697 - CrystEngComm. 23 - 27, pp. 4848 - 4856. (Reino Unido): 2021. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/d1ce00490e>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 5
- 40** Mahmoudi, G.; Afkhami, F.A.; Zangrando, E.; Kaminsky, W.; Frontera, A.; Safin, D.A. A supramolecular 3D structure constructed from a new metal chelate self-assembled from Sn(NCS)2 and phenyl(pyridin-2-yl)methylenepicolinohydrazide. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1224, (Holanda): 2021. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.129188>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
- 41** Manel Vega; Salvador Blasco; Enrique García-España; Bartolomé Soberats; Antonio Frontera; Carmen Rotger; Antonio Costa. Dual role of silver in a fluorogenic N-squaraine probe based on Ag(I)- $\pi\pi$ interactions. 912705 - Dalton Transactions. 50, pp. 9367. (Reino Unido): 2021. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/d1dt01408k>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

- 42** Gomila, R.M.; Bauza, A.; Mooibroek, T.J.; Frontera, A.-Hole spodium bonding in tri-coordinated Hg(ii) complexes. 912705 - Dalton Transactions. 50 - 22, pp. 7545 - 7553. (Reino Unido): 2021. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/d1dt01235e>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 4

- 43** Rozhkov, A.V.; Ananyev, I.V.; Petrov, A.A.; Galmés, B.; Frontera, A.; Bokach, N.A.; Kukushkin, V.Y. Ligand Steric Hindrances Switch Bridging (2-I)···O, O to Two-Center I···O Halogen-Bonding Mode in the Assembly of Diketonate Copper(II) Species. 911335 - Crystal Growth & Design. 21 - 7, pp. 4073 - 4082. (Estados Unidos de América): 2021. ISSN 1528-7483

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.1c00373>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

- 44** Ahmed, M.N.; Madni, M.; Anjum, S.; Andleeb, S.; Hameed, S.; Khan, A.M.; Ashfaq, M.; Tahir, M.N.; Gil, D.M.; Frontera, A. Crystal engineering with pyrazolyl-thiazole derivatives: Structure-directing role of -stacking and -hole interactions. 912697 - Crystengcomm. 23 - 18, pp. 3276 - 3287. (Reino Unido): 2021. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/d1ce00256b>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 10

- 45** Biswas, N.; Saha, S.; Zangrando, E.; Frontera, A.; Choudhury, C.R. Catecholase-like activity and theoretical study in solid state of a new ru(III)-schiff base complex. 910516 - Acta Chimica Slovenica. 68 - 1, pp. 212 - 221. (Eslovenia): 2021. ISSN 1318-0207

DOI: <https://doi.org/10.17344/acsi.2020.6379>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

- 46** Pal, P.; Das, K.; Hossain, A.; Gomila, R.M.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Synthesis and crystal structure of the simultaneous binding of Ni(ii) cation and chloride by the protonated 2,4,6 tris-(2-pyridyl)-1,3,5 triazine ligand: theoretical investigations of anion, and hydrogen bonding interactions. 900672 - New Journal of Chemistry. 45 - 26, pp. 11689 - 11696. (Francia): 2021. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/d1nj01880a>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

- 47** Pranay Sharma; Hiren Nath; Antonio Frontera; Miquel Barceló-Oliver; Akalesh K. Verma; Sahid Hussain; Manjit K. Bhattacharyya. Biologically relevant Unusual Cooperative assemblies and Fascinating Infinite Crown-like Supramolecular Nitrate- Water hosts involving Guest Complex Cations in Bipyridine and Phenanthroline-based Cu(II) Coordination Compounds: Antiproliferative Evaluation and Theoretical studies. 900672 - New Journal of Chemistry. 45, pp. 8269 - 8282. (Francia): 2021. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/d1nj01004b>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista



Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

- 48** Daolio, A.; Pizzi, A.; Calabrese, M.; Terraneo, G.; Bordignon, S.; Frontera, A.; Resnati, G. Molecular Electrostatic Potential and Noncovalent Interactions in Derivatives of Group 8 Elements. 900624 - Angewandte Chemie-International Edition. (Alemania): 2021. ISSN 1433-7851

DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.202107978>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

- 49** Caprice, K.; Pál, D.; Besnard, C.; Galmés, B.; Frontera, A.; Cougnon, F.B.L. Diastereoselective Amplification of a Mechanically Chiral [2]Catenane. 900665 - Journal of the American Chemical Society. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2021. ISSN 0002-7863

DOI: <https://doi.org/10.1021/jacs.1c06557>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

- 50** Frontera, A.; Bauzá, A. Biological halogen bonds in protein-ligand complexes: a combined QTAIM and NCIPLOT study in four representative cases. 912818 - Organic & Biomolecular Chemistry. 19 - 31, pp. 6858 - 6864. (Reino Unido): 2021. ISSN 1477-0520

DOI: <https://doi.org/10.1039/d1ob01212f>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 2

- 51** Llull, R.; Montalbán, G.; Vidal, I.; Gomila, R.M.; Bauzá, A.; Frontera, A. Theoretical study of sodium bonding in the active site of three Zn-proteins and several model systems. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 23 - 31, pp. 16888 - 16896. (Reino Unido): 2021. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/d1cp02150h>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

- 52** Rosselló, Y.; Benito, M.; Barceló-Oliver, M.; Frontera, A.; Molins, E. 1-Ethyluracil, a New Scaffold for Preparing Multicomponent Forms: Synthesis, Characterization, and Computational Studies. 911335 - Crystal Growth & Design. (Estados Unidos de América): 2021. ISSN 1528-7483

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.1c00175>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

- 53** Thakur, S.; Gomila, R.M.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. A theoretical insight into the formation of chalcogen bonding (ChB) interactions involving coordinated DMSO molecules as -hole donors and benzoate groups as -hole acceptors in a dinuclear copper(II) complex. 912697 - Crystengcomm. 23 - 29, pp. 5087 - 5096. (Reino Unido): 2021. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/d1ce00624j>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 4

- 54** Ashashi, N.A.; Kumar, M.; ul Nisa, Z.; Frontera, A.; Sahoo, S.C.; Sheikh, H.N. Solvothermal self assembly of three lanthanide(III)-succinates: Crystal structure, topological analysis and DFT calculations on water channel. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1245, (Holanda): 2021. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.131094>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
- 55** Priola, E.; Mahmoudi, G.; Andreo, J.; Frontera, A. Unprecedented [d9]Cu[d10]Au coinage bonding interactions in {Cu(NH₃)₄[Au(CN)₂]}+[Au(CN)₂]salt. 909184 - Chemical Communications. 57 - 59, pp. 7268 - 7271. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2021. ISSN 1359-7345
DOI: <https://doi.org/10.1039/d1cc02709c>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 4
- 56** García-Márquez, A.; Frontera, A.; Roisnel, T.; Gramage-Doria, R. Ultrashort H+Hintermolecular distance in a supramolecular system in the solid state. 909184 - Chemical Communications. 57 - 58, pp. 7112 - 7115. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2021. ISSN 1359-7345
DOI: <https://doi.org/10.1039/d1cc02143e>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 4
- 57** Hiren Nath; Pranay Sharma; Rosa M. Gomila; Antonio Frontera; Miquel Barceló-Oliver; Akalesh K. Verma; Kasturi Dutta; Manjit K. Bhattacharyya. Unconventional Enclathration of Guest Adipic acid and Energetically Significant Antiparallel π -stacked Ternary Assemblies involving unusual Regium- π (Chelate) Contacts in Phenanthroline-based Ni(II) and Cu(II) Compounds: Antiproliferative Evaluation and Theoretical Studies. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1245, pp. 131038. (Holanda): 2021. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.131038>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
- 58** Castiñeiras, A.; Fernández-Hermida, N.; García-Santos, I.; Gómez-Rodríguez, L.; Gil, D.M.; Frontera, A. Supramolecular, spectroscopic and computational analysis of weak interactions in some thiosemicarbazones derived from 5-acetylbarbituric acid. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1245, (Holanda): 2021. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.131031>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
- 59** Das, A.; Sharma, P.; Frontera, A.; Barcelo-Oliver, M.; Verma, A.K.; Ahmed, R.S.; Hussain, S.; Bhattacharyya, M.K. Supramolecular assemblies involving biologically relevant antiparallel -stacking and unconventional solvent driven structural topology in maleato and fumarato bridged Zn(ii) coordination polymers: antiproliferative evaluation and theoretical studies. 900672 - New Journal of Chemistry. 45 - 29, pp. 13040 - 13055. (Francia): 2021. ISSN 1144-0546
DOI: <https://doi.org/10.1039/d1nj00619c>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8

- 60** Fernández Riveras, J.A.; Frontera, A.; Bauzá, A. Selenium chalcogen bonds are involved in protein-carbohydrate recognition: A combined PDB and theoretical study. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 23 - 32, pp. 17656 - 17662. (Reino Unido): 2021. ISSN 1463-9076
DOI: <https://doi.org/10.1039/d1cp01929e>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 3
- 61** Suslonov, V.V.; Soldatova, N.S.; Ivanov, D.M.; Galmés, B.; Frontera, A.; Resnati, G.; Postnikov, P.S.; Kukushkin, V.Yu.; Bokach, N.A. Diaryliodonium Tetrachloroplatinates(II): Recognition of a Trifurcated Metal-Involving 3-I(Cl,Cl,Pt) Halogen Bond. 911335 - Crystal Growth & Design. (Estados Unidos de América): 2021. ISSN 1528-7483
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.1c00654>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 9
- 62** Sharma, P.; Dutta, D.; Gomila, R.M.; Frontera, A.; Barcelo-Oliver, M.; Verma, A.K.; Bhattacharyya, M.K. Benzoate bridged dinuclear Mn(II) and Cu(II) compounds involving guest chlorobenzoates and dimeric paddle wheel supramolecular assemblies: Antiproliferative evaluation and theoretical studies. 900768 - Polyhedron. 208, (Reino Unido): 2021. ISSN 0277-5387
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2021.115409>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 7
- 63** Guo, C.-X.; Schwedtmann, K.; Fidelius, J.; Hennersdorf, F.; Dickschat, A.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Weigand, J.J. Bifunctional Fluorophosphonium Triflates as Intramolecular Frustrated Lewis Pairs: Reversible CO₂ Sequestration and Binding of Carbonyls, Nitriles and Acetylenes. 908895 - Chemistry-A European Journal. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2021. ISSN 0947-6539
DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.202102382>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
- 64** María de las Nieves Piña; Antonio Frontera; Antonio Bauza. Charge Assisted S/Se Chalcogen Bonds in SAM Riboswitches: A Combined PDB and ab Initio Study. 913322 - Acs Chemical Biology. (Estados Unidos de América): 2021. ISSN 1554-8929
DOI: <https://doi.org/10.1021/acscchembio.1c00417>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 3
- 65** Mirostaw, B.; Mahmoudi, G.; Ferenc, W.; Cristóvão, B.; Osypiuk, D.; Sarzynski, J.; Guchowska, H.; Franconetti, A.; Frontera, A. Halogen interactions in dinuclear copper(II) 2,4-dibromophenoxyacetate crystal structure and quantum chemical calculations. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1202, (Holanda): 2020. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.127227>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 9
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL
Índice de impacto: 3.196 **Revista dentro del 25%:** No

**Posición de publicación:** 83**Num. revistas en cat.:** 162

- 66** Das, K.; Massera, C.; Garribba, E.; Frontera, A.; Datta, A. Synthesis, structural and DFT interpretation of a Schiff base assisted Mn(III) derivative. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1199, (Holanda): 2020. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.126985>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 5
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL
Índice de impacto: 3.196 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 83 **Num. revistas en cat.:** 162
- 67** Bazargan, M.; Mirzaei, M.; Aghamohamadi, M.; Tahmasebi, M.; Frontera, A. Supramolecular assembly of a 2D coordination polymer bearing pyridine-N-oxide-2,5-dicarboxylic acid and copper ion: X-ray crystallography and DFT calculations. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1202, (Holanda): 2020. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.127243>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 5
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL
Índice de impacto: 3.196 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 83 **Num. revistas en cat.:** 162
- 68** Dbuleanu, D.; Bauzá, A.; Ortega-Castro, J.; Escudero-Adán, E.C.; Ballester, P.; Frontera, A. Synthesis, X-ray Characterization and Density Functional Theory (DFT) Studies of Two Polymorphs of the ,,, Isomer of Tetra-p-Iodophenyl Tetramethyl Calix[4]pyrrole: On the Importance of Halogen Bonds. 910462 - Molecules. 25 - 2, (Suiza): MDPI, 2020. ISSN 1420-3049
DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules25020285>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY
Índice de impacto: 4.411 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 116 **Num. revistas en cat.:** 298

Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 4.411 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 63 **Num. revistas en cat.:** 179
- 69** Bauzá, A.; Frontera, A. -Hole noble gas bonding interactions: Insights from theory and experiment. 900750 - Coordination Chemistry Reviews. 404, (Holanda): 2020. ISSN 0010-8545
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2019.213112>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 2
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Índice de impacto: 22.315 **Revista dentro del 25%:** Si
Posición de publicación: 1 **Num. revistas en cat.:** 45

- 70** Nath, H.; Sharma, P.; Frontera, A.; Verma, A.K.; Das, A.; Barceló-Oliver, M.; Bhattacharyya, M.K. Energetically significant unconventional OH contacts involving discrete guest (H₂O)₈ clusters in a fumarato bridged polymeric supramolecular host of Ni(II) phenanthroline: Antiproliferative evaluation and theoretical studies. 900768 - Polyhedron. 176, (Reino Unido): 2020. ISSN 0277-5387
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2019.114266>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 7
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Índice de impacto: 3.052 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 17 **Num. revistas en cat.:** 45

Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY
Índice de impacto: 3.052 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 8 **Num. revistas en cat.:** 26
- 71** Shankar, R.; Singh, R.; Kociok-Köhn, G.; Frontera, A. A combined experimental and computational study of a supramolecular assembly based on cationic zinc(II)-ethanesulfonate. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1202, (Holanda): 2020. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.127206>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 4
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL
Índice de impacto: 3.196 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 83 **Num. revistas en cat.:** 162
- 72** Sergi Bujosa; Eduardo Castellanos; Antonio Frontera; Carmen Rotger; Antonio Costa; Bartolome Soberats. Self-assembly of amphiphilic aryl-squaramides in water driven by dipolar π - π interactions. 912818 - Organic & Biomolecular Chemistry. 18, pp. 888 - 894. (Reino Unido): 2020. Disponible en Internet en: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2020/ob/c9ob02085c#!divAbstract>>. ISSN 1477-0520
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, ORGANIC
Índice de impacto: 3.876 **Revista dentro del 25%:** Si
Posición de publicación: 13 **Num. revistas en cat.:** 57
- 73** Das, K.; Datta, A.; Frontera, A.; Wen, Y.-S.; Roma-Rodrigues, C.; Raposo, L.R.; Fernandes, A.R.; Hung, C.-H. Zn(II) and Co(II) derivatives anchored with scorpionate precursor: Antiproliferative evaluation in human cancer cell lines. 900757 - Journal of Inorganic Biochemistry. 202, (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 0162-0134
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2019.110881>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY
Índice de impacto: 4.155 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 129 **Num. revistas en cat.:** 298

Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Índice de impacto: 4.155 **Revista dentro del 25%:** Si

Posición de publicación: 9

Num. revistas en cat.: 45

- 74** Mandal, T.; Dey, A.; Seth, S.K.; Ortega-Castro, J.; Rheingold, A.L.; Ray, P.P.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Influence of 2-Amino-4-methylpyridine and 2-Aminopyrimidine Ligands on the Malonic Acid-Cu(II) System: Insights through Supramolecular Interactions and Photoresponse Properties. 919226 - Acs Omega. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 2470-1343

DOI: <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b02971>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 3.512

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 78

Num. revistas en cat.: 179

- 75** Mirdya, S.; Drew, M.G.B.; Chandra, A.K.; Banerjee, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. A series of hydrogen bond mediated dinuclear nickel(II) complexes with reduced Schiff base ligands: An insight into the nature of their short intermolecular hydrogen bonds. 900768 - Polyhedron. 179, (Reino Unido): 2020. ISSN 0277-5387

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2020.114374>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 3.052

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 17

Num. revistas en cat.: 45

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Índice de impacto: 3.052

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 8

Num. revistas en cat.: 26

- 76** Saa, J.M.; Frontera, A. On the Role of Water as a Catalyst in Prebiotic Chemistry. 910825 - Chemphyschem. (Alemania): 2020. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.201901069>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 3.102

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 89

Num. revistas en cat.: 162

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Índice de impacto: 3.102

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 11

Num. revistas en cat.: 37

- 77** Martínez, D.; Pérez, A.; Cañellas, S.; Silió, I.; Lancho, A.; García-Raso, A.; Fiol, J.J.; Terrón, A.; Barceló-Oliver, M.; Ortega-Castro, J.; Molins, E.; Frontera, A. Synthesis, reactivity, X-ray characterization and docking studies of N7/N9- (2-pyrimidyl)-adenine derivatives. 900757 - Journal of Inorganic Biochemistry. 203, pp. 110879. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 0162-0134

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

**Nº total de autores:** 12**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.155**Posición de publicación:** 129**Categoría:** BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 298**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.155**Posición de publicación:** 9**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45

- 78** Chowhan, B.; Gupta, M.; Sharma, N.; Frontera, A. DFT analysis of supra-molecular assemblies of substituted 4H-pyran derivatives. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1207, (Holanda): 2020. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.127785>

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 4**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.196**Posición de publicación:** 83**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 162

- 79** Ghosh, T.K.; Mahapatra, P.; Drew, M.G.B.; Franconetti, A.; Frontera, A.; Ghosh, A. The Effect of Guest Metal Ions on the Reduction Potentials of Uranium(VI) Complexes: Experimental and Theoretical Investigations. 908895 - Chemistry-A European Journal. 26 - 7, pp. 1612 - 1623. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2020. ISSN 0947-6539

DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201904253>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 5.236**Posición de publicación:** 52**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 179

- 80** García-Raso, A.; Terrón, A.; Ortega-Castro, J.; Barceló-Oliver, M.; Lorenzo, J.; Rodríguez-Calado, S.; Franconetti, A.; Frontera, A.; Vázquez-López, E.; Fiol, J.J. Iridium(III) coordination of N(6)modified adenine derivatives with amino acid chains. 900757 - Journal of Inorganic Biochemistry. 205, pp. 111000. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 0162-0134

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 10**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.155**Posición de publicación:** 129**Categoría:** BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 298**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.155**Posición de publicación:** 9**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45

- 81** Encarnación Navarro García; Bartomeu Galmés; María D. Velasco; Antonio Frontera; Antonio Caballero. Anion Recognition by Neutral Chalcogen Bonding Receptors: Experimental and Theoretical Investigations. 908895 - Chemistry-A European Journal. 26, pp. 4706 - 4713. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2020. ISSN 0947-6539



DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201905786>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.236

Posición de publicación: 52

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 179

- 82** Encarnación Navarro García; Bartomeu Galmés; María D. Velasco; Antonio Frontera; Antonio Caballero. Anion Recognition by Neutral Chalcogen Bonding Receptors: Experimental and Theoretical Investigations. 908895 - Chemistry-A European Journal. 26, pp. 4706 - 4713. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2020. ISSN 0947-6539

DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201905786>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.236

Posición de publicación: 52

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 179

- 83** Kletskov, A.V.; Gil, D.M.; Frontera, A.; Zaytsev, V.P.; Merkulova, N.L.; Beltsova, K.R.; Sinelshchikova, A.A.; Grigoriev, M.S.; Grudova, M.V.; Zubkov, F.I. Intramolecular sp²-sp³ disequalization of chemically identical sulfonamide nitrogen atoms: Single crystal x-ray diffraction characterization, hirshfeld surface analysis and dft calculations of n-substituted hexahydro-1,3,5-triazines. 918343 - Crystals. 10 - 5, (Suiza): 2020. ISSN 2073-4352

DOI: <https://doi.org/10.3390/cryst10050369>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 10

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.589

Posición de publicación: 9

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 26

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.589

Posición de publicación: 204

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 335

- 84** Belmont-Sánchez, J.C.; Ruiz-González, N.; Frontera, A.; Matilla-Hernández, A.; Castiñeiras, A.; Niclós-Gutiérrez, J. Anioncation recognition pattern, thermal stability and dft-calculations in the crystal structure of h₂ dap[cd(Hedta)(h₂ o)] salt (h₂ dap = h₂ (n₃,n₇)-2,6-diaminopurinium cation). 918343 - Crystals. 10 - 4, (Suiza): 2020. ISSN 2073-4352

DOI: <https://doi.org/10.3390/cryst10040304>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.589

Posición de publicación: 9

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 26

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY



Índice de impacto: 2.589
Posición de publicación: 204

Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 335

- 85** Saha, D.; Gayen, S.; Maity, T.; Frontera, A.; Ortega-Castro, J.; Leus, K.; Wang, G.; Van Der Voort, P.; Brandão, P.; Koner, S. Combined experimental and computational studies on preferential CO₂ adsorption over a zinc-based porous framework solid. 900672 - New Journal of Chemistry. 44 - 5, pp. 1806 - 1816. (Francia): 2020. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/c9nj04154k>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 10

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 3.591

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 75

Num. revistas en cat.: 179

- 86** Sharma, P.; Gogoi, A.; Verma, A.K.; Frontera, A.; Bhattacharyya, M.K. Charge-assisted hydrogen bond and nitrilenitrile interaction directed supramolecular associations in Cu(II) and Mn(II) coordination complexes: Anticancer, hematotoxicity and theoretical studies. 900672 - New Journal of Chemistry. 44 - 14, pp. 5473 - 5488. (Francia): 2020. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0nj00075b>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 3.591

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 75

Num. revistas en cat.: 179

- 87** Biswas, B.K.; Saha, S.; Biswas, N.; Chowdhury, M.; Frontera, A.; Rizzoli, C.; Roy Choudhury, R.; Roy Choudhury, C. Two copper (II) complexes derived from anthranilic acid and 4-iodo-anthranilic acid Schiff bases: Structural elucidation, halogen bonding interactions and catalytic study using 3,5-DTBC. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1217, (Holanda): 2020. ISSN 0022-2860

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.128398>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 3.196

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 83

Num. revistas en cat.: 162

- 88** Ruiz-González, N.; García-Rubiño, M.E.; Domínguez-Martín, A.; Choquesillo-Lazarte, D.; Franconetti, A.; Frontera, A.; Castiñeiras, A.; González-Pérez, J.M.; Niclós-Gutiérrez, J. Molecular and supramolecular recognition patterns in ternary copper(II) or zinc(II) complexes with selected rigid-planar chelators and a synthetic adenine-nucleoside. 900757 - Journal of Inorganic Biochemistry. 203, (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 0162-0134

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2019.110920>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY

Índice de impacto: 4.155

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 129

Num. revistas en cat.: 298

Fuente de impacto: WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.155**Posición de publicación:** 9**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45

- 89** Alkorta, I.; Elguero, J.; Frontera, A. Not only hydrogen bonds: Other noncovalent interactions. 918343 - Crystals. 10 - 3, (Suiza): 2020. ISSN 2073-4352

DOI: <https://doi.org/10.3390/cryst10030180>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 3**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.589**Posición de publicación:** 9**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 26**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.589**Posición de publicación:** 204**Categoría:** MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 335

- 90** Bartomeu Galmés; Aida Juan Bals; Antonio Frontera; Giuseppe Resnati. Charge assisted chalcogen bonds: CSD and DFT analyses and biological implication in glucosidase inhibitors. 908895 - Chemistry-A European Journal. pp. 4599 - 4606. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2020. ISSN 0947-6539

DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201905498>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 4**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 5.236**Posición de publicación:** 52**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 179

- 91** Bauzá, A.; Frontera, A. Halogen and Chalcogen Bond Energies Evaluated Using Electron Density Properties. 910825 - Chemphyschem. 21 - 1, pp. 26 - 31. (Alemania): 2020. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.201901001>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 2**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.102**Posición de publicación:** 89**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 162**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.102**Posición de publicación:** 11**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR &
CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 37

- 92** Ghosh, K.; Dutta, T.; Drew, M.G.B.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. A combined experimental and theoretical study on an ionic cobalt(III/II) complex with a Schiff base ligand. 900768 - Polyhedron. 182, (Reino Unido): 2020. ISSN 0277-5387

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2020.114432>

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.052**Posición de publicación:** 17**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.052**Posición de publicación:** 8**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 45**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 26

- 93** Terrón, A.; Buils, J.; Mooibroek, T.J.; Barceló-Oliver, M.; García-Raso, A.; Fiol, J.J.; Frontera, A. Synthesis, X-ray characterization and regium bonding interactions of a trichlorido(1-hexylcytosine)gold(III) complex. 909184 - Chemical Communications. 56 - 24, pp. 3524 - 3527. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2020. ISSN 1359-7345

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0cc00505c>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 6.222**Posición de publicación:** 44**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 179

- 94** Elizaveta A. Kvyatkovskaya; Eugeniya V. Nikitina; Victor N. Khrustalev; Bartomeu Galmés; Fedor I. Zubkov; Antonio Frontera. Through-Space 'Alpha-Effect' between the Bridging Oxygen Atoms in Diepoxybenzo[de]isothiochromene Derivates. 910608 - European Journal of Organic Chemistry. pp. 156 - 161. (Alemania): 2020. ISSN 1434-193X

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejoc.201901169>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.021**Posición de publicación:** 22**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, ORGANIC**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 57

- 95** Bhattacharyya, M.K.; Saha, U.; Dutta, D.; Frontera, A.; Verma, A.K.; Sharma, P.; Das, A. Unconventional DNA-relevant -stacked hydrogen bonded arrays involving supramolecular guest benzoate dimers and cooperative anion-/-anion contacts in coordination compounds of Co(II) and Zn(II) phenanthroline: Experimental and theoretical studies. 900672 - New Journal of Chemistry. 44 - 11, pp. 4504 - 4518. (Francia): 2020. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/c9nj05727g>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.591**Posición de publicación:** 75**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 179

- 96** Yannick Roselló; Mónica Benito; Núria Bagués; Núria Martínez; Alba Moradell; Ignasi Mata; Judit Galcerà; Miquel Barceló-Oliver; Antonio Frontera; Elies Molins. 9!Ethyladenine: Mechanochemical Synthesis, Characterization, and DFT Calculations of Novel Cocrystals and Salts. 911335 - Crystal Growth & Design. 20, pp. 2985 - 2997. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 1528-7483

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.9b01628>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 10

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.076

Posición de publicación: 67

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.076

Posición de publicación: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.076

Posición de publicación: 128

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 179

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 26

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 335

- 97** De Las Nieves Piña, M.; Bauzá, A.; Frontera, A. Halogen-halogen interactions in decahalo-: Closo -carboranes: CSD analysis and theoretical study. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 22 - 11, pp. 6122 - 6130. (Reino Unido): 2020. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0cp00114g>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.676

Posición de publicación: 77

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.676

Posición de publicación: 8

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 162

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 37

- 98** Adak, P.; Ghosh, B.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Herron, S.R.; Chattopadhyay, S.K. Binuclear and tetranuclear Zn(ii) complexes with thiosemicarbazones: Synthesis, X-ray crystal structures, ATP-sensing, DNA-binding, phosphatase activity and theoretical calculations. 917082 - Rsc Advances. 10 - 22, pp. 12735 - 12746. (Reino Unido): 2020. ISSN 2046-2069

DOI: <https://doi.org/10.1039/c9ra10549b>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.361

Posición de publicación: 81

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 179

- 99** Walrant, A.; Bauzá, A.; Girardet, C.; Alves, I.D.; Lecomte, S.; Illien, F.; Cardon, S.; Chaianantakul, N.; Pallerla, M.; Burlina, F.; Frontera, A.; Sagan, S. Ionpair- interactions favor cell penetration of arginine/tryptophan-rich cell-penetrating peptides. 910546 - Biochimica et Biophysica Acta-Biomembranes. 1862 - 2, (Holanda): 2020. ISSN 0005-2736
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.bbamem.2019.183098>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 12
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY
Índice de impacto: 3.747
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 158
Num. revistas en cat.: 298

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: BIOPHYSICS
Índice de impacto: 3.747
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 27
Num. revistas en cat.: 72
- 100** Mirzaei, M.; Sadeghi, F.; Molčanov, K.; Zarba, J. K.; Gomila, R. M.; Frontera, A. Recurrent Supramolecular Motifs in a Series of Acid-Base Adducts Based on Pyridine-2,5-Dicarboxylic Acid N -Oxide and Organic Bases: Inter- and Intramolecular Hydrogen Bonding. 911335 - Crystal Growth & Design. 20 - 3, pp. 1738 - 1751. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 1528-7483
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.9b01475>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Nº total de autores: 6
Revista dentro del 25%: No
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Num. revistas en cat.: 179
Índice de impacto: 4.076
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Posición de publicación: 67
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 4.076
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 5
Num. revistas en cat.: 335

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 4.076
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 128
Num. revistas en cat.: 335
- 101** Bhaumik, P.K.; Banerjee, A.; Dutta, T.; Chatterjee, S.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Diminishing accessibility of electrophilic nickel(ii) centres due to incorporation of a methylene spacer in the pendant side arm of a series of heterotrinnuclear nickel(ii)/sodium complexes: a DFT study using a homodesmotic equation. 912697 - Crystengcomm. 22 - 17, pp. 2970 - 2977. (Reino Unido): 2020. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ce00251h>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Nº total de autores: 6
Revista dentro del 25%: No
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Num. revistas en cat.: 179
Índice de impacto: 3.545
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Posición de publicación: 76
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Índice de impacto: 3.545
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 6
Num. revistas en cat.: 26

- 102** Roeleveld, J.J.; Lekanne Deprez, S.J.; Verhoofstad, A.; Frontera, A.; van der Vlugt, J.I.; Mooibroek, T.J. Engineering Crystals Using sp³-C Centred Tetrel Bonding Interactions. 908895 - Chemistry-A European Journal. 26 - 44, pp. 10126 - 10132. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2020. ISSN 0947-6539
DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.202002613>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 5.236 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 52 **Num. revistas en cat.:** 179
- 103** M Nieves Piña; Antonio Frontera; Antonio Bauzá. Quantifying Intramolecular Halogen Bonds in Nucleic Acids: A Combined Protein Data Bank and Theoretical Study. 913322 - Acs Chemical Biology. 15 - 7, pp. 1942 - 1948. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 1554-8929
DOI: <https://doi.org/10.1021/acscchembio.0c00292>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 3
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY
Índice de impacto: 5.1 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 87 **Num. revistas en cat.:** 298
- 104** Kletskov, A.V.; Frontera, A.; Sinelshchikova, A.A.; Grigoriev, M.S.; Zaytsev, V.P.; Grudova, M.V.; Bunev, A.S.; Presnukhina, S.; Shetnev, A.; Zubkov, F.I. Straightforward Three-Component Synthesis of N,N-Disubstituted N-Alkyl-1,3,5-Triazines. 900803 - Synlett. 31 - 11, pp. 1067 - 1072. (Alemania): 2020. ISSN 0936-5214
DOI: <https://doi.org/10.1055/s-0039-1690900>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 10
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, ORGANIC
Índice de impacto: 2.454 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 28 **Num. revistas en cat.:** 57
- 105** Mondal, A.; Das, C.; Corbella, M.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Saha, M.; Mondal, S.; Das Saha, K.; Chattopadhyay, S.K. Biological promiscuity of a binuclear Cu(II) complex of aminoguanidine Schiff base: DNA binding, anticancer activity and histidine sensing ability of the complex. 900672 - New Journal of Chemistry. 44 - 18, pp. 7319 - 7328. (Francia): 2020. ISSN 1144-0546
DOI: <https://doi.org/10.1039/c9nj05712a>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 9
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 3.591 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 75 **Num. revistas en cat.:** 179
- 106** Pal, P.; Hossain, A.; Mukhopadhyay, S.; Das, K.; Frontera, A. Supramolecular and theoretical perspectives of 2,2':6,2'-terpyridine based Ni(II) and Cu(II) complexes: On the importance of C-H...Cl and interactions. 900672 - New Journal of Chemistry. 44 - 18, pp. 7310 - 7318. (Francia): 2020. ISSN 1144-0546
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0nj00094a>

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.591**Posición de publicación:** 75**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 179

- 107** Sen, C.; Kumar, M.; ul Nisa, Z.; Akhter Ashashi, N.; Frontera, A.; Chandra Sahoo, S.; Nawaz Sheikh, H. Coordination polymers of manganese(II), cobalt(II), nickel(II) and cadmium(II) decorated with rigid pyrazine-2,3-dicarboxylic acid linker: Synthesis, structural diversity, DFT study and magneto-luminescence properties. 900768 - Polyhedron. 187, (Reino Unido): 2020. ISSN 0277-5387

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2020.114629>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.052**Posición de publicación:** 17**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 45**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.052**Posición de publicación:** 8**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 26

- 108** Gomila, R. M.; Frontera, A. Covalent and Non-covalent Noble Gas Bonding Interactions in XeFn Derivatives (n = 2-6): A Combined Theoretical and ICSD Analysis. 918579 - Frontiers In Chemistry. 8, (Suiza): 2020. ISSN 2296-2646

DOI: <https://doi.org/10.3389/fchem.2020.00395>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 2**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 5.221**Posición de publicación:** 53**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 179

- 109** Akbari Afkhami, F.; Mahmoudi, G.; Mirosław, B.; Qu, F.; Gupta, A.; Frontera, A.; Zubkov, F.I.; Zangrando, E.; Safin, D.A. Complexes of BiCl₃ with hydrazone derived ligands: a Möbius-like discrete metal chelate versus a salt-like porous polymeric structure. 900672 - New Journal of Chemistry. 44 - 22, pp. 9429 - 9437. (Francia): 2020. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0nj00930j>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 9**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.591**Posición de publicación:** 75**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 179

- 110** Mahmoudi, G.; Seth, S.K.; Riera, A.B.; Zubkov, F.I.; Frontera, A. Novel Pb(II) complexes: X-ray structures, Hirshfeld surface analysis and DFT calculations. 918343 - Crystals. 10 - 7, pp. 1 - 15. (Suiza): 2020. ISSN 2073-4352

DOI: <https://doi.org/10.3390/cryst10070568>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.589

Posición de publicación: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.589

Posición de publicación: 204

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 26

Categoría: MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 335

- 111** Belmont-Sánchez, J.C.; García-Rubiño, M.E.; Frontera, A.; Matilla-Hernández, A.; Castiñeiras, A.; Niclós-Gutiérrez, J. Novel cd (II) coordination polymers afforded with edta or trans-1,2-cdta chelators and imidazole, adenine, or 9-(2-hydroxyethyl) adenine coligands. 918343 - Crystals. 10 - 5, (Suiza): 2020. ISSN 2073-4352

DOI: <https://doi.org/10.3390/cryst10050391>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.589

Posición de publicación: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.589

Posición de publicación: 204

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 26

Categoría: MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 335

- 112** Bartomeu Galmés; Jaume Adrover; Giancarlo Terraneo; Antonio Frontera; Giuseppe Resnati. Radical...radical chalcogen bonds: CSD analysis and DFT calculations. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 22, pp. 12757 - 12765. (Reino Unido): 2020. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0cp01643h>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.676

Posición de publicación: 77

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.676

Posición de publicación: 8

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 162

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR &
CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 37

- 113** Rozhkov, A.V.; Ananyev, I.V.; Gomila, R.M.; Frontera, A.; Kukushkin, V.Y. Hole... dz 2[PtII] Interactions with Electron-Deficient Arenes Enhance the Phosphorescence of PtII-Based Luminophores. 900752 - Inorganic Chemistry. 59 - 13, pp. 9308 - 9314. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 0020-1669

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c01170>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 5.165
Posición de publicación: 5

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 45

- 114** Katlenok, E.A.; Haukka, M.; Levin, O.V.; Frontera, A.; Kukushkin, V.Y. Supramolecular Assembly of Metal Complexes by (Aryl)Idz2 [PtII] Halogen Bonds. 908895 - Chemistry-A European Journal. 26 - 34, pp. 7692 - 7701. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2020. ISSN 0947-6539

DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.202001196>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 5.236

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 52

Num. revistas en cat.: 179

- 115** Bauzá, A.; Alkorta, I.; Elguero, J.; Mooibroek, T.J.; Frontera, A. Spodium Bonds: Noncovalent Interactions Involving Group 12 Elements. 002017 - Angewandte Chemie. Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2020. ISSN 0044-8249

DOI: <https://doi.org/10.1002/ange.202007814>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

- 116** Bauzá, A.; Alkorta, I.; Elguero, J.; Mooibroek, T.J.; Frontera, A. Spodium Bonds: Noncovalent Interactions Involving Group 12 Elements. 900624 - Angewandte Chemie-International Edition. 59 - 40, pp. 17482 - 17487. (Alemania): 2020. ISSN 1433-7851

DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.202007814>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 15.336

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 16

Num. revistas en cat.: 179

- 117** Miquel Oliver; Miquel Adrover; Antonio Frontera; Joaquin Ortega-Castro; Manuel Miró*. In-vitro prediction of the membranotropic action of emerging organic contaminants using a liposome-based multidisciplinary approach. 901502 - Science of the Total Environment. 738, pp. 140096. (Holanda): Elsevier B.V., 2020. Disponible en Internet en: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0048969720336160?via%3Dihub>>. ISSN 0048-9697

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.140096>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: ENVIRONMENTAL SCIENCES

Índice de impacto: 7.963

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 25

Num. revistas en cat.: 274

- 118** Goswami, S.; Singha, S.; Saha, I.; Chatterjee, A.; Dey, S.K.; Gómez García, C.J.; Frontera, A.; Kumar, S.; Saha, R. Selective Metal-Ligand Bond-Breaking Driven by Weak Intermolecular Interactions: From Metamagnetic Mn(III)-Monomer to Hexacyanoferrate(II)-Bridged Metamagnetic Mn₂Fe Trimer. 900752 - Inorganic Chemistry. 59 - 12, pp. 8487 - 8497. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 0020-1669

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c00909>

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 9**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 5.165**Posición de publicación:** 5**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45

- 119** Naeem Ahmed, M.; Yasin, K.A.; Aziz, S.; Khan, S.U.; Tahir, M.N.; Gil, D.M.; Frontera, A. Relevant p-hole tetrel bonding interactions in ethyl 2-triazolyl-2-oxoacetate derivatives: Hirshfeld surface analysis and DFT calculations. 912697 - Crystengcomm. 22 - 21, pp. 3567 - 3578. (Reino Unido): 2020. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ce00335b>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.545**Posición de publicación:** 76**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 179**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.545**Posición de publicación:** 6**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 26

- 120** Gil, D.M.; Pérez, H.; Echeverría, G.A.; Piro, O.E.; Frontera, A. Role of Imidazole CoLigand in the Supramolecular Network of a Co(II) Complex with Sulfadiazine: Crystal Structure, Hirshfeld Surface Analysis and Energetic Calculations. 918593 - Chemistryselect. 5 - 21, pp. 6331 - 6338. (Alemania): 2020. ISSN 2365-6549

DOI: <https://doi.org/10.1002/slct.202001567>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.109**Posición de publicación:** 116**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 179

- 121** Andrea Gini; Miguel Paraja; Bartomeu Galmés; Celine Besnard; Amalia I. Poblador Bahamonde; Naomi Sakai; Antonio Frontera; Stefan Matile. Pnictogen-bonding catalysis: brevetoxin-type polyether cyclizations. 915573 - Chemical Science. 11, pp. 7086 - 7091. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2020. ISSN 2041-6520

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0sc02551h>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 8**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 9.825**Posición de publicación:** 22**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 179

- 122** Frontera, A.; Bauzá, A. Halogen Bonds in Protein Nucleic Acid Recognition. 913200 - Journal Of Chemical Theory And Computation. 16 - 7, pp. 4744 - 4752. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 1549-9618

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jctc.0c00431>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Tipo de soporte:** Revista



Nº total de autores: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 6.006

Posición de publicación: 47

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 6.006

Posición de publicación: 5

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 162

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 37

- 123** Nath, H.; Dutta, D.; Sharma, P.; Frontera, A.; Verma, A.K.; Barceló-Oliver, M.; Devi, M.; Bhattacharyya, M.K. Adipato bridged novel hexanuclear Cu(ii) and polymeric Co(ii) coordination compounds involving cooperative supramolecular assemblies and encapsulated guest water clusters in a square grid host: Antiproliferative evaluation and theoretical studies. 912705 - Dalton Transactions. 49 - 28, pp. 9863 - 9881. (Reino Unido): 2020. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0dt01007c>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.39

Posición de publicación: 8

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 45

- 124** Bofill, L.; De Sande, D.; Barbas, R.; Frontera, A.; Prohens, R. A late appearing polymorph of nutraceutical pterostilbene. 912697 - Crystengcomm. 22 - 28, pp. 4680 - 4684. (Reino Unido): 2020. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ce00837k>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.545

Posición de publicación: 76

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 179

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.545

Posición de publicación: 6

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 26

- 125** Mahmoudi, G.; Abedi, M.; Lawrence, S.E.; Zangrando, E.; Babashkina, M.G.; Klein, A.; Frontera, A.; Safin, D.A. Tetrel bonding and other non-covalent interactions assisted supramolecular aggregation in a new Pb(II) complex of an isonicotinohydrazide. 910462 - Molecules. 25 - 18, (Suiza): MDPI, 2020. ISSN 1420-3049

DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules25184056>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.411

Posición de publicación: 116

Tipo de soporte: Revista

Categoría: BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 298

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.411

Posición de publicación: 63

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 179

- 126** Angel García-Raso; Angel Terrón; Bartomeu Balle; Adela López-Zafra; Antonio Frontera; Miquel Barceló-Oliver; Juan J. Fiol. Crystal structures of N6-modified-amino acid nucleobase analogs(III): adenine-valeric acid, adenine-hexanoic acid and adenine- gabapentine. 900672 - New Journal of Chemistry. 44, pp. 12236 - 12246. (Francia): 2020. ISSN 1144-0546
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0nj02538k>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 7
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.591
Posición de publicación: 75
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 179
- 127** Mahmoudi, G.; Kubicki, M.; Choquesillo-Lazarte, D.; Miroslaw, B.; Alexandrov, E.V.; Zolotarev, P.N.; Frontera, A.; Safin, D.A. Supramolecular architectures of Mn(NCS)₂ complexes with N'-(1-(pyridin-4-yl)ethylidene)picolinohydrazide and N'-(phenyl(pyridin-4-yl)methylene)isonicotinohydrazide. 900768 - Polyhedron. 190, (Reino Unido): 2020. ISSN 0277-5387
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2020.114776>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.052
Posición de publicación: 17
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 45
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.052
Posición de publicación: 8
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 26
- 128** Ward, J.S.; Fiorini, G.; Frontera, A.; Rissanen, K. Asymmetric [N-I-N]+halonium complexes. 909184 - Chemical Communications. 56 - 60, pp. 8428 - 8431. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2020. ISSN 1359-7345
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0cc02758h>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 4
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 6.222
Posición de publicación: 44
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 179
- 129** Madni, M.; Ahmed, M.N.; Hafeez, M.; Ashfaq, M.; Tahir, M.N.; Gil, D.M.; Galmés, B.; Hameed, S.; Frontera, A. Recurrent - stacking motifs in three new 4,5-dihydropyrazolyl-thiazole-coumarin hybrids: X-ray characterization, Hirshfeld surface analysis and DFT calculations. 900672 - New Journal of Chemistry. 44 - 34, pp. 14592 - 14603. (Francia): 2020. ISSN 1144-0546
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0nj02931a>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 9
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.591
Posición de publicación: 75
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 179



- 130** Bibi, A.; Khan, I.; Andleeb, H.; Simpson, J.; Tahir, M.N.; Hameed, S.; Frontera, A. Synthesis, X-ray characterization, Hirshfeld surface analysis and DFT calculations on tetrazolyl-phenol derivatives: H-bonds vs CH/ interactions. 900839 - Journal of Molecular Structure. (Holanda): 2020. ISSN 0022-2860

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.129425>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 3.196

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 83

Num. revistas en cat.: 162

- 131** Frontera, A. Noble gas bonding interactions involving xenon oxides and fluorides. 910462 - Molecules. 25 - 15, (Suiza): MDPI, 2020. ISSN 1420-3049

DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules25153419>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY

Índice de impacto: 4.411

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 116

Num. revistas en cat.: 298

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 4.411

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 63

Num. revistas en cat.: 179

- 132** Piña, M.L.N.; Frontera, A.; Bauzá, A. Regium- Bonds Are Involved in Protein-Gold Binding. 916028 - Journal Of Physical Chemistry Letters. 11 - 19, pp. 8259 - 8263. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 1948-7185

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.0c02295>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 6.475

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 38

Num. revistas en cat.: 162

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 6.475

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 79

Num. revistas en cat.: 335

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Índice de impacto: 6.475

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 3

Num. revistas en cat.: 37

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Índice de impacto: 6.475

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 35

Num. revistas en cat.: 107

- 133** Basak, T.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. A theoretical insight into non-covalent supramolecular interactions in the solid state structures of two octahedral iron(III) complexes. 912697 - Crystengcomm. 22 - 35, pp. 5731 - 5742. (Reino Unido): 2020. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ce00955e>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 3.545

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 76

Num. revistas en cat.: 179

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Índice de impacto: 3.545

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 6

Num. revistas en cat.: 26

- 134** Kumar Bhaumik, P.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Exploitation of the electron deficient outer O4 compartment of a compartmental Schiff base to act as H-bond acceptors in forming a self-assembled dimer of a manganese(III) complex: A joint experimental and theoretical venture. 900768 - Polyhedron. 189, (Reino Unido): 2020. ISSN 0277-5387

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2020.114711>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 3.052

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 17

Num. revistas en cat.: 45

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Índice de impacto: 3.052

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 8

Num. revistas en cat.: 26

- 135** García-Raso, A.; Terrón, A.; Roselló, Y.; Frontera, A.; Castillo, O.; Beobide, G.; Perez-Yañez, S.; Escudero-Adán, E.C.; Fiol, J.J. Metal removal from the secondary building unit of bio-MOF-1 by adenine N6-alkylation while retaining the overall 3D porous topology. 912697 - Crystengcomm. 22, pp. 4201 - 4205. (Reino Unido): 2020. ISSN 1466-8033

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 3.545

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 76

Num. revistas en cat.: 179

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Índice de impacto: 3.545

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 6

Num. revistas en cat.: 26

- 136** Frontera, A. -and -Hole Interactions. 918343 - Crystals. 10 - 9, pp. 1 - 4. (Suiza): 2020. ISSN 2073-4352

DOI: <https://doi.org/10.3390/cryst10090721>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.589
Posición de publicación: 9

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 26

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.589
Posición de publicación: 204

Categoría: MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 335

- 137** Shybek, I.; Aster, A.; Cheng, Y.; Sakai, N.; Frontera, A.; Vauthey, E.; Matile, S. Naphthalenediimides with Cyclic Oligochalcogenides in Their Core. 908895 - Chemistry-A European Journal. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2020. ISSN 0947-6539

DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.202003550>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.236
Posición de publicación: 52

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 179

- 138** Chetry, S.; Sharma, P.; Frontera, A.; Dutta, D.; Verma, A.K.; Bhattacharyya, M.K. Unconventional formation of a 1D-chain of H-bonded water molecules in bipyridine-based supramolecular hexameric hosts of isostructural coordination compounds of Co(II) and Zn(II): Antiproliferative evaluation and theoretical studies. 900768 - Polyhedron. 191, (Reino Unido): 2020. ISSN 0277-5387

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2020.114809>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.052
Posición de publicación: 17

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 45

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.052
Posición de publicación: 8

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 26

- 139** Carreras, L.; Franconetti, A.; Grabulosa, A.; Frontera, A.; Vidal-Ferran, A. Selective functionalisation of aromatic alcohols with supramolecularly regulated gold(i) catalysts. 918327 - Organic Chemistry Frontiers. 7 - 13, pp. 1626 - 1634. (China): 2020. ISSN 2052-4129

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0qo00416b>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.281
Posición de publicación: 8

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 57

- 140** Rozhkov, A.V.; Eliseeva, A.A.; Baykov, S.V.; Galmés, B.; Frontera, A.; Kukushkin, V.Y. One-pot route to X-perfluoroarenes (X = Br, I) based on FeIII-assisted C-F functionalization and utilization of these arenes as building blocks for crystal engineering involving halogen bonding. 911335 - Crystal Growth & Design. 20 - 9, pp. 5908 - 5921. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 1528-7483
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.0c00606>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 4.076
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 67
Num. revistas en cat.: 179
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Índice de impacto: 4.076
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 5
Num. revistas en cat.: 26
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 4.076
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 128
Num. revistas en cat.: 335
- 141** Bhaumik, P.K.; Banerjee, A.; Dutta, T.; Chatterjee, S.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Erratum: Diminishing accessibility of electrophilic nickel(ii) centres due to incorporation of a methylene spacer in the pendant side arm of a series of heterotrinnuclear nickel(ii)/sodium complexes: A DFT study using a homodesmotic equation (CrystEngComm (2020) 22 (2970-2977) DOI: 10.1039/D0CE00251H). 912697 - Crystengcomm. 22 - 31, (Reino Unido): 2020. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ce90103b>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 3.545
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 76
Num. revistas en cat.: 179
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Índice de impacto: 3.545
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 6
Num. revistas en cat.: 26
- 142** Soldatova, N.S.; Postnikov, P.S.; Suslonov, V.V.; Kissler, T.Y.; Ivanov, D.M.; Yusubov, M.S.; Galmés, B.; Frontera, A.; Kukushkin, V.Y. Diaryliodonium as a double s-hole donor: The dichotomy of thiocyanate halogen bonding provides divergent solid state arylation by diaryliodonium cations. 918327 - Organic Chemistry Frontiers. 7 - 16, pp. 2230 - 2242. (China): 2020. ISSN 2052-4129
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0qo00678e>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 9
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC
Índice de impacto: 5.281
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 8
Num. revistas en cat.: 57

- 143** Bofill, L.; Prohens, R.; Barbas, R.; Frontera, A. DFT Analysis of Uncommon ...H-Bond Array Interaction in a New Pterostilbene/Theophylline Cocrystal. 911335 - Crystal Growth & Design. 20 - 10, pp. 6691 - 6698. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 1528-7483
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.0c00845>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Nº total de autores: 4
Revista dentro del 25%: No
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.076
Num. revistas en cat.: 179
Posición de publicación: 67
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.076
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26
Posición de publicación: 5
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.076
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 335
Posición de publicación: 128
- 144** Zelenkov, L.E.; Ivanov, D.M.; Sadykov, E.K.; Bokach, N.A.; Galmés, B.; Frontera, A.; Kukushkin, V.Yu. Semicoordination Bond Breaking and Halogen Bond Making Change the Supramolecular Architecture of Metal-Containing Aggregates. 911335 - Crystal Growth & Design. 20 - 10, pp. 6956 - 6965. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 1528-7483
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.0c00999>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Nº total de autores: 7
Revista dentro del 25%: No
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.076
Num. revistas en cat.: 179
Posición de publicación: 67
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.076
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26
Posición de publicación: 5
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.076
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 335
Posición de publicación: 128
- 145** Karmakar, M.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Methylene spacer regulated variation in supramolecular assembly of zinc(II) dicyanamide complexes with reduced Schiff base ligands: Synthesis, structure and DFT study. 912697 - Crystengcomm. 22 - 41, pp. 6876 - 6885. (Reino Unido): 2020. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ce01105c>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Nº total de autores: 3
Revista dentro del 25%: No
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.545
Num. revistas en cat.: 179
Posición de publicación: 76



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.545
Posición de publicación: 6

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26

- 146** Jana, N.C.; Brandañ, P.; Frontera, A.; Panja, A.A facile biomimetic catalytic activity through hydrogen atom abstraction by the secondary coordination sphere in manganese(III) complexes. 912705 - Dalton Transactions. 49 - 40, pp. 14216 - 14230. (Reino Unido): 2020. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0dt02431g>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 4.39

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 8

Num. revistas en cat.: 45

- 147** Alvarez-Lorenzo, C.; Castiñeiras, A.; Frontera, A.; García-Santos, I.; González-Pérez, J.M.; Niclós-Gutiérrez, J.; Rodríguez-González, I.; Vilchez-Rodríguez, E.; Zarba, J.K.Recurrent motifs in pharmaceutical cocrystals involving glycolic acid: X-ray characterization, Hirshfeld surface analysis and DFT calculations. 912697 - Crystengcomm. 22 - 40, pp. 6674 - 6689. (Reino Unido): 2020. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ce01064b>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 3.545

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 76

Num. revistas en cat.: 179

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Índice de impacto: 3.545

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 6

Num. revistas en cat.: 26

- 148** Dutta, D.; Sharma, P.; Frontera, A.; Gogoi, A.; Verma, A.K.; Dutta, D.; Sarma, B.; Bhattacharyya, M.K.Oxalato bridged coordination polymer of manganese(III) involving unconventional O-hole(nitrile) and antiparallel nitrilenitrile contacts: Antiproliferative evaluation and theoretical studies. 900672 - New Journal of Chemistry. 44 - 46, pp. 20021 - 20038. (Francia): 2020. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0nj03712e>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 3.591

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 75

Num. revistas en cat.: 179

- 149** Rana, A.; Galmés, B.; Frontera, A.; Biswal, H.S.; Chopra, D.Unravelling the electronic nature of C-FO-C non-covalent interaction in proteins and small molecules in the solid state. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 22 - 44, pp. 25704 - 25711. (Reino Unido): 2020. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0cp05280a>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.676
Posición de publicación: 77

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 162

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.676
Posición de publicación: 8

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 37

- 150** Grudova, M.V.; Gil, D.M.; Khrustalev, V.N.; Nikitina, E.V.; Sinelshchikova, A.A.; Grigoriev, M.S.; Kletskov, A.V.; Frontera, A.; Zubkov, F.I. Synthesis, X-ray characterization and theoretical study of 3: A,6:7,9 a-diepoxybenzo [de] isoquinoline derivatives: On the importance of FO interactions. 900672 - New Journal of Chemistry. 44 - 46, pp. 20167 - 20180. (Francia): 2020. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0nj04328a>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.591
Posición de publicación: 75

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 179

- 151** Gomila, R.M.; Frontera, A. Charge assisted halogen and pnictogen bonds: insights from the Cambridge Structural Database and DFT calculations. 912697 - Crystengcomm. 22 - 43, pp. 7162 - 7169. (Reino Unido): 2020. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ce00220h>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.545
Posición de publicación: 76

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 179

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.545
Posición de publicación: 6

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26

- 152** Mahmoudi, G.; Lawrence, S.E.; Cisterna, J.; Cárdenas, A.; Brito, I.; Frontera, A.; Safin, D.A. A new spodium bond driven coordination polymer constructed from mercury(ii) azide and 1,2-bis(pyridin-2-ylmethylene)hydrazine. 900672 - New Journal of Chemistry. 44 - 48, pp. 21100 - 21107. (Francia): 2020. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0nj04444j>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.591
Posición de publicación: 75

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 179

- 153** Efimenko, Z.M.; Eliseeva, A.A.; Ivanov, D.M.; Galmés, B.; Frontera, A.; Bokach, N.A.; Kukushkin, V.Y. Bifurcated 2-I... (N,O) Halogen Bonding: The Case of (Nitrosoguanidinate)NiII Cocrystals with Iodine(I)-Based -Hole Donors. 911335 - Crystal Growth & Design. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 1528-7483

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.0c01408>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.076

Posición de publicación: 67

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.076

Posición de publicación: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.076

Posición de publicación: 128

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 179

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 26

Categoría: MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 335

- 154** Tripathi, S.; Islam, S.; Seth, S.K.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Supramolecular assemblies involving salt bridges: DFT and X-ray evidence of bipolarity. 912697 - Crystengcomm. 22 - 47, pp. 8171 - 8181. (Reino Unido): 2020. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ce01356k>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.545

Posición de publicación: 76

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.545

Posición de publicación: 6

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 179

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 26

- 155** Verdugo-Escamilla, C.; Alarcón-Payer, C.; Frontera, A.; Acebedo-Martínez, F.J.; Domínguez-Martín, A.; Gómez-Morales, J.; Choquesillo-Lazarte, D. Interconvertible hydrochlorothiazidecaffeine multicomponent pharmaceutical materials: A solvent issue. 918343 - Crystals. 10 - 12, pp. 1 - 19. (Suiza): 2020. ISSN 2073-4352

DOI: <https://doi.org/10.3390/cryst10121088>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.589

Posición de publicación: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.589

Posición de publicación: 204

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 26

Categoría: MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 335

- 156** Adhikari, S.; Bhattacharjee, T.; Das, A.; Roy, S.; Daniliuc, C.G.; Zarba, J.K.; Bauzá, A.; Frontera, A. On the supramolecular properties of neutral, anionic and cationic cadmium complexes harvested from dithiolate-polyamine binary ligand systems. 912697 - Crystengcomm. 22 - 46, pp. 8023 - 8035. (Reino Unido): 2020. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ce01233e>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.545

Posición de publicación: 76

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.545

Posición de publicación: 6

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 179

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 26

- 157** Kletskov, A.V.; Zatykina, A.D.; Grudova, M.V.; Sinelshchikova, A.A.; Grigoriev, M.S.; Zaytsev, V.P.; Gil, D.M.; Novikov, R.A.; Zubkov, F.I.; Frontera, A. Raise the anchor! Synthesis, X-ray and NMR characterization of 1,3,5-triazinanes with an axial: Tert -butyl group. 912818 - Organic & Biomolecular Chemistry. 18 - 41, pp. 8386 - 8394. (Reino Unido): 2020. ISSN 1477-0520

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ob01201g>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 10

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.876

Posición de publicación: 13

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 57

- 158** Bhunia, P.; Ghosh, S.; Gomila, R.M.; Frontera, A.; Ghosh, A. Reaction of Cu(II) chelates with uranyl nitrate to form a coordination complex or H-bonded adduct: Experimental observations and rationalization by theoretical calculations. 900752 - Inorganic Chemistry. 59 - 21, pp. 15848 - 15861. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 0020-1669

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c02338>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.165

Posición de publicación: 5

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 45

- 159** Schoemaker, R.; Schwedtmann, K.; Hennersdorf, F.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Weigand, J.J. Toward N,P-doped -extended PAHs: A one-pot synthesis to diannulated 1,4,2-diazaphospholium triflate salts. 900789 - Journal of Organic Chemistry. 85 - 22, pp. 14420 - 14434. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2020. ISSN 0022-3263

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.joc.0c00577>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.354

Posición de publicación: 12

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 57

- 160** Saeed, A.; Khurshid, A.; Flörke, U.; Echeverría, G.A.; Piro, O.E.; Gil, D.M.; Rocha, M.; Frontera, A.; El-Seedi, H.R.; Mumtaz, A.; Erben, M.F. Intermolecular interactions in antipyrine-like derivatives 2-halo-: N-(1,5-dimethyl-3-oxo-2-phenyl-2,3-dihydro-1 H -pyrazol-4-yl)benzamides: X-ray structure, Hirshfeld surface analysis and DFT calculations. 900672 - New Journal of Chemistry. 44 - 45, pp. 19541 - 19554. (Francia): 2020. ISSN 1144-0546
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0nj03958f>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 11
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 3.591
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 75
Num. revistas en cat.: 179
- 161** Sharma, P.; Sarma, P.; Frontera, A.; Barceló-Oliver, M.; Verma, A.K.; Sarma, B.; Barthakur, T.; Bhattacharyya, M.K. Energetically significant cooperative -stacked ternary assemblies in Ni(II) phenanthroline compounds involving discrete water clusters: Anticancer activities and theoretical studies. 900839 - Journal of Molecular Structure. (Holanda): 2020. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.129486>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Índice de impacto: 3.196
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 83
Num. revistas en cat.: 162
- 162** Maity, S.; Ghosh, T.K.; Gomila, R.M.; Frontera, A.; Ghosh, A. Recurrent (arene)(chelate ring) motifs in four trinuclear CuII 2MII(M = Cd/Zn) complexes derived from an unsymmetrical N2O2 donor ligand: Structural and theoretical investigations. 912697 - Crystengcomm. 22 - 44, pp. 7673 - 7683. (Reino Unido): 2020. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0ce01219j>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 5
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 3.545
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 76
Num. revistas en cat.: 179
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Índice de impacto: 3.545
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 6
Num. revistas en cat.: 26
- 163** Mahmoudi, G.; Masoudiasl, A.; Babashkina, M.G.; Frontera, A.; Doert, T.; White, J.M.; Zangrando, E.; Zubkov, F.I.; Safin, D.A. On the importance of -hole spodium bonding in tricoordinated HgII complexes. 912705 - Dalton Transactions. 49 - 48, pp. 17547 - 17551. (Reino Unido): 2020. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/d0dt03938a>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 9
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Índice de impacto: 4.39
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 8
Num. revistas en cat.: 45

- 164** Barbas, R.; Kumar, V.; Vallcorba, O.; Prohens, R.; Frontera, A. Sildenafilresorcinol cocrystal: XRPD structure and DFT calculations. 918343 - Crystals. 10 - 12, pp. 1 - 9. (Suiza): 2020. ISSN 2073-4352

DOI: <https://doi.org/10.3390/cryst10121126>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Índice de impacto: 2.589

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 9

Num. revistas en cat.: 26

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 2.589

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 204

Num. revistas en cat.: 335

- 165** Purkayastha, A.; Dhar, S.; Mondal, S.P.; Franconetti, A.; Frontera, A.; Ganguly, R.; Kirillov, A.M.; Misra, T.K. Metal-organic architectures driven by a multifunctional 6-aminouracil spacer: Structures, noncovalent interactions, and conductivity. 912697 - Crystengcomm. 22 - 4, pp. 829 - 840. (Reino Unido): 2020. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/c9ce01437c>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 3.545

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 76

Num. revistas en cat.: 179

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Índice de impacto: 3.545

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 6

Num. revistas en cat.: 26

- 166** Afkhami, F. A.; Mahmoudi, G.; Khandar, A. A.; Franconetti, A.; Zangrando, E.; Qureshi, N.; Lipkowski, J.; Gurbanov, A. V.; Frontera, A. Tetranuclear MnII/ZnII and Novel Azido-Bridged Chair-Shaped Heptanuclear CdII Compounds: The Effect of Metal Ion and Coordination Mode of the Azide Group on the Structure of the Products. 910604 - European Journal of Inorganic Chemistry. 2019, pp. 262 - 270. (Desconocido): 2019. ISSN 1434-1948

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic.201801254>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 2.529

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 16

Num. revistas en cat.: 45

- 167** Dutta, D.; Nath, H.; Frontera, A.; Bhattacharyya, M. K. A novel oxalato bridged supramolecular ternary complex of Cu(II) involving energetically significant π -hole interaction: Experimental and theoretical studies. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 487, pp. 354 - 361. (Suiza): 2019. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2018.12.037>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.304
Posición de publicación: 20

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 45

- 168** Kumar, M.; Sheikh, H. N.; Fraconetti, A.; Zareba, J. K.; Sahoo, S. C.; Frontera, A. 2,5-Furandicarboxylic acid as a linker for lanthanide coordination polymers: the role of heteroaromatic π - π stacking and hydrogen bonding. 900672 - New Journal of Chemistry. 43, pp. 2179 - 2195. (Francia): 2019. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/c8nj05701j>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 3.288

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 68

Num. revistas en cat.: 177

- 169** Nashre-ul-Islam, S. M.; Dutta, D.; Frontera, A.; Bhattacharyya, M. K. Supramolecular association involving nitrile-nitrile interactions in polymeric Mn(II) coordination complexes: A combined experimental and theoretical study. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 487, pp. 424 - 432. (Suiza): 2019. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2018.12.055>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 2.304

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 20

Num. revistas en cat.: 45

- 170** Khan, S.; Roy, S.; Harms, K.; Bauza, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Observation of an anion...anion interaction in a square planar copper(II) Schiff base complex: DFT study and CSD analysis. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 487, pp. 465 - 472. (Suiza): 2019. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2018.12.032>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 2.304

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 20

Num. revistas en cat.: 45

- 171** Saha, U.; Dutta, D.; Nath, H.; Franconetti, A.; Frontera, A.; Bhattacharyya, M. K. Supramolecular association in Cu(II) coordination complexes involving energetically significant NO...NO π -hole interaction and cooperative π -stacked ternary assembly: Experimental and theoretical studies. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 488, pp. 159 - 169. (Suiza): 2019. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2019.01.015>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 2.304

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 20

Num. revistas en cat.: 45

- 172** Martinez, M. S.; Bauza, A.; Caubet, A.; Garcia-Raso, A.; Terron, A.; Fiol, J. J.; Molins, E.; Barcelo-Oliver, M.; Frontera, A. Cu(II)-N6-alkyladenine complexes: synthesis, X-ray characterization and magnetic properties. 919500 - Magnetochemistry. 4, (Suiza): 2019. ISSN 2312-7481

DOI: <https://doi.org/10.3390/magnetochemistry4020024>

**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1,947**Posición de publicación:** 22**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1,947**Posición de publicación:** 109**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1,947**Posición de publicación:** 201**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 45**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 159**Categoría:** MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 314

- 173** Ghosh, K.; Harms, K.; Franconetti, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. A triple alkoxo bridged dinuclear cobalt(III) complex mimicking phosphatase and showing ability to degrade organic dye contaminants by photocatalysis. 900790 - Journal of Organometallic Chemistry. 883, pp. 52 - 64. (Suiza): 2019. ISSN 0022-328X

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jorgchem.2019.01.006>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.304**Posición de publicación:** 20**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.304**Posición de publicación:** 26**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 45**Categoría:** CHEMISTRY, ORGANIC**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 57

- 174** Carreras, L.; Benet-Buchholz, J.; Franconetti, A.; Frontera, A.; van Leeuwen, P. W. N. M.; Vidal-Ferran, A. Halogen bonding effects on the outcome of reactions at metal centres. 909184 - Chemical Communications. 55, pp. 2380 - 2383. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2019. ISSN 1359-7345

DOI: <https://doi.org/10.1039/c8cc08884e>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 10**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 5.996**Posición de publicación:** 34**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 177

- 175** Hajiashrafi, T.; Zekriazadeh, R.; Flanagan, K. J.; Kia, F.; Bauza, A.; Frontera, A.; Senge, M. O. The role of π - π stacking and hydrogen-bonding interactions in the assembly of a series of isostructural group IIB coordination compounds. 918334 - Acta Crystallographica a-Foundation And Advances. 75, pp. 178 - 188. (Reino Unido): 2019. ISSN 2053-2733

DOI: <https://doi.org/10.1107/s2053229618018314>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1.96**Posición de publicación:** 107**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 177

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.96
Posición de publicación: 15

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 26

- 176** Thakur, S.; Drew, Michael G. B.; Franconetti, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Analysis of energies of halogen and hydrogen bonding interactions in the solid state structures of vanadyl Schiff base complexes. 917082 - Rsc Advances. 9, pp. 4789 - 4796. (Reino Unido): 2019. ISSN 2046-2069

DOI: <https://doi.org/10.1039/c8ra09947b>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.119

Posición de publicación: 73

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 177

- 177** Andleeb, H.; Khan, I.; Franconetti, A.; Tahir, M. N.; Simpson, J.; Hameed, S.; Frontera, A. Diverse structural assemblies of U-shaped hydrazinyl-sulfonamides: experimental and theoretical analysis of non-covalent interactions stabilizing solid state conformations. 912697 - Crystengcomm. 21, pp. 1780 - 1793. (Reino Unido): 2019. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/c8ce01917g>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.117

Posición de publicación: 74

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 177

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.117

Posición de publicación: 7

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 26

- 178** Bauza, A.; Frontera, A. Regium- π vs. Cation- π interactions in M₂ and MCl (M = Cu, Ag and Au) complexes with small aromatic systems: an ab initio study. 002649 - Inorganics. 6, MDPI, 2019. ISSN 2304-6740

DOI: <https://doi.org/10.3390/inorganics6030064>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

- 179** Pons, R.; Ibáñez, C.; Buades, A.; Franconetti, A.; García-Raso, A.; Fiol, J.J.; Terrón, A.; Molins, E.; Frontera, A. Synthesis, X-ray characterization and density functional theory studies of N6-benzyl-N6-methyladenine-M(II) complexes (M=Zn, Cd): The prominent role of π - π , C-H $\cdots$ π and anion- π interactions. 908026 - Applied Organometallic Chemistry. 33: e4906, (Reino Unido): 2019. ISSN 0268-2605

DOI: <https://doi.org/10.1002/aoc.4906>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.14

Posición de publicación: 19

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, APPLIED

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 71

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.14

Posición de publicación: 11

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 45

- 180** Begum, I.; Schnakenburg, G.; Han, Z.; Franconetti, A.; Frontera, A.; Gates, D. P.; Streubel, R. From P-Functional Thiazol-2-thione Derivatives to Phosphaalkenes. 910608 - European Journal of Organic Chemistry. 2019, pp. 1697 - 1705. (Alemania): 2019. ISSN 1434-193X
DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic.201900031>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.889
Posición de publicación: 19
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 57
- 181** Das, K.; Goswami, S.; Beyene, B. B.; Yibeltal, A. W.; Massera, C.; Garribba, E.; Frontera, A.; Canturk, Z.; Askun, T.; Datta, A. Spectral, electrochemical and DFT studies of a trimetallic CuI Derivative: Antimycobacterial and cytotoxic activity. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 490, pp. 155 - 162. (Suiza): 2019. ISSN 0020-1693
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2019.03.014>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.304
Posición de publicación: 20
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 45
- 182** Bazargan, M.; Mirzaei, M.; Franconetti, A.; Frontera, A. On the preferences of five-membered chelate rings in coordination chemistry: insights from the Cambridge Structural Database and theoretical calculations. 912705 - Dalton Transactions. 48, pp. 5476 - 5490. (Reino Unido): 2019. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/c9dt00542k>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.174
Posición de publicación: 5
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 45
- 183** Mandal, T.; Dey, A.; Pathak, S.; Islam, Md. M.; Konar, S.; Ortega-Castro, J.; Seth, S. K.; Ray, P. P.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Structures, photoresponse properties and DNA binding abilities of 4-(4-pyridinyl)-2-pyridone salts. 917082 - Rsc Advances. 9, pp. 9663 - 9677. (Reino Unido): 2019. Disponible en Internet en: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2019/ra/c9ra00666d>>. ISSN 2046-2069
DOI: <https://doi.org/10.1039/c9ra00666d>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.119
Posición de publicación: 73
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 177
- 184** Franconetti, A.; Frontera, A. Theoretical and Crystallographic Study of Lead(IV) Tetrel Bonding Interactions. 908895 - Chemistry-A European Journal. 25, pp. 6007 - 6013. (Alemania): Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., 2019. ISSN 0947-6539
DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201900447>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Tipo de soporte: Revista



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.857
Posición de publicación: 44

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 177

- 185** Tahmasebi, M.; Mirzaei, M.; Eshtiagh-Hosseini, H.; Mague, J. T.; Bauza, A.; Frontera, A. An inorganic-organic hybrid supramolecular framework based on the γ -[Mo₈O₂₆]⁴⁻ cluster and cobalt complex of aspartic acid: X-ray structure and DFT study. 918334 - Acta Crystallographica a-Foundation And Advances. 75, pp. 469 - 477. (Reino Unido): 2019. ISSN 2053-2733

DOI: <https://doi.org/10.1107/s2053229619004029>

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.96
Posición de publicación: 107

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 177

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.96
Posición de publicación: 15

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 26

- 186** Bartomeu Galmés; Daniel Martínez; Maria F. Infante-Carrió; Antonio Franconetti; Antonio Frontera. Theoretical ab Initio Study on Cooperativity Effects between Nitro Pi-hole and Halogen Bonding Interactions. 910825 - Chemphyschem. 20 - 9, pp. 1135 - 1144. (Alemania): 2019. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.201900142>

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 5

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.144
Posición de publicación: 72

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 159

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.144
Posición de publicación: 10

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 37

- 187** Ahmed, M. N.; Arif, M.; Jabeen, F.; Khan, H. A.; Yasin, K. A.; Tahir, M. N.; Franconetti, A.; Frontera, A. On the importance of antiparallel π - π interactions in the solid state of isatin-based hydrazides. 900672 - New Journal of Chemistry. 43, pp. 8122 - 8131. (Francia): 2019. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/c9nj00405j>

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.288
Posición de publicación: 68

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 177

- 188** Mandal, T.; Pathak, S.; Dey, A.; Islam, Md. M.; Seth, S. K.; Masum, A. A.; Ortega-Castro, J.; Ray, P. P.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Structures, Photoresponse Properties, and Biological Activity of Dicyano-Substituted 4-Aryl-2-pyridone Derivatives. 919226 - Acs Omega. 4, pp. 7200 - 7212. (Estados Unidos de América): 2019. ISSN 2470-1343

DOI: <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b00289>

**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.87**Posición de publicación:** 81**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 177

- 189** Ganguly, S.; Bauza, A.; Frontera, A.; Ghosh, A. *ri-nuclear copper-cadmium complexes of a N2O2-donor ligand with the variation of counter anions: Structural elucidation and theoretical study on inter-molecular interactions*. 900754 - *Inorganica Chimica Acta*. 492, pp. 142 - 149. (Suiza): 2019. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2019.04.013>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.304**Posición de publicación:** 20**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 45

- 190** Gogoi, A.; Das, A.; Frontera, A.; Verma, A. K.; Bhattacharyya, M. K. *Energetically significant unconventional π - π contacts involving fumarate in a novel coordination polymer of Zn(II): In-vitro anticancer evaluation and theoretical studies*. 900754 - *Inorganica Chimica Acta*. 493, pp. 1 - 13. (Suiza): 2019. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2019.04.047>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.304**Posición de publicación:** 20**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 45

- 191** Caprice, K.; Pupier, M.; Bauza, A.; Frontera, A.; Cougnon, F. B. L. *Synchronized On/Off Switching of Four Binding Sites for Water in a Molecular Solomon Link*. 900624 - *Angewandte Chemie-International Edition*. 58, pp. 8053 - 8057. (Alemania): 2019. ISSN 1433-7851

DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.201902278>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 12.959**Posición de publicación:** 15**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 177

- 192** 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. (Reino Unido): 2019. ISSN 1463-9076

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.43**Posición de publicación:** 66**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 159**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.43**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si

Posición de publicación: 8**Num. revistas en cat.:** 37

- 193** Gogoi, A.; Dutta, Debajit; V., Akalesh K.; Nath, H.; Frontera, A.; Guha, A. K.; Bhattacharyya, M. K. Energetically favorable anti-electrostatic hydrogen bonded cationic clusters in Ni(II) 3,5-dimethylpyrazole complexes: Anticancer evaluation and theoretical studies. 900768 - Polyhedron. 168, pp. 113 - 126. (Reino Unido): 2019. ISSN 0277-5387
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2019.04.043>

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Índice de impacto:** 2.343**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 18**Num. revistas en cat.:** 45**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Índice de impacto:** 2.343**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 11**Num. revistas en cat.:** 26

- 194** Prohens, R.; de Sande, D.; Font-Bardia, M.; Franconetti, A.; Gonzalez, J. F.; Frontera, A. Gallic Acid Dimer As a Double π -Hole Donor: Evidence from X-ray, Theoretical Calculations, and Generalization from the Cambridge Structural Database. 911335 - Crystal Growth & Design. 19, pp. 3989 - 3997. (Estados Unidos de América): 2019. ISSN 1528-7483

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.9b00387>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 10**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 4.089**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 52**Num. revistas en cat.:** 177**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Índice de impacto:** 4.089**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 5**Num. revistas en cat.:** 26**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 4.089**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 92**Num. revistas en cat.:** 314

- 195** Garcia-Raso, A.; Terron, A.; Lopez-Zafra, A.; Garcia-Viada, A.; Barta, A.; Frontera, A.; Lorenzo, J.; Rodriguez-Calado, S.; Vazquez-Lopez, E. M.; Fiol, J. J. Crystal structures of N6-modified-amino acid related nucleobase analogs (II): hybrid adenine- β -alanine and adenine-GABA molecules. 900672 - New Journal of Chemistry. 43, pp. 9680 - 9688. (Francia): 2019. Disponible en Internet en: <<http://www.mdpi.com/2312-7481/4/2/24>>. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/c9nj02279a>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 10**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 3.288**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 68**Num. revistas en cat.:** 177



- 196** Bhattacharyya, M. K.; Saha, U.; Dutta, D.; Das, A.; Verma, A. K.; Frontera, A. Solvent-driven structural topology involving energetically significant intra- and intermolecular chelate ring contacts and anticancer activities of Cu(II) phenanthroline complexes involving benzoates: experimental and theoretical studies. 917082 - Rsc Advances. 9, pp. 16339 - 16356. (Reino Unido): 2019. ISSN 2046-2069
DOI: <https://doi.org/10.1039/c9ra01181a>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 3.119 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 73 **Num. revistas en cat.:** 177
- 197** Kumar, M.; Wu, L.; Kariem, M.; Franconetti, A.; Sheikh, H. N.; Liu, S.; Sahoo, S. C.; Frontera, A. A Series of Lanthanide-Based Metal-Organic Frameworks Derived from Furan-2,5-dicarboxylate and Glutarate: Structure-Corroborated Density Functional Theory Study, Magnetocaloric Effect, Slow Relaxation of Magnetization, and Luminescent Properties. 900752 - Inorganic Chemistry. (Estados Unidos de América): 2019. ISSN 0020-1669
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.9b00219>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 10
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Índice de impacto: 4.825 **Revista dentro del 25%:** Si
Posición de publicación: 4 **Num. revistas en cat.:** 45
- 198** Schwedtmann, K.; Haberstroh, J.; Roediger, S.; Bauza, A.; Frontera, A.; Hennersdorf, F.; Weigand, J. J. Formation of an imidazoliumyl-substituted [(LC)4P4]4+ tetracation and transition metal mediated fragmentation and insertion reaction (LC = NHC). 915573 - Chemical Science. 10, pp. 6868 - 6875. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2019. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/C5SC01386K>>. ISSN 2041-6520
DOI: <https://doi.org/10.1039/c9sc01701a>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 9.346 **Revista dentro del 25%:** Si
Posición de publicación: 21 **Num. revistas en cat.:** 177
- 199** Franconetti, Antonio; Frontera, Antonio. 'Like-like' tetrel bonding interactions between Sn centres: a combined ab initio and CSD study. 912705 - Dalton Transactions. (Reino Unido): 2019. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/c9dt01953g>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Índice de impacto: 4.174 **Revista dentro del 25%:** Si
Posición de publicación: 5 **Num. revistas en cat.:** 45
- 200** 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>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0



- 201** Yannick Roselló; Mónica Benito; Elies Molins; Miquel Barceló-Oliver; Antonio Frontera. Adenine as a Halogen Bond Acceptor: A combined experimental and DFT study. 918343 - Crystals. 9, pp. 224. (Suiza): 2019. ISSN 2073-4352
DOI: <https://doi.org/10.3390/cryst9040224>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/149320>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 5
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.404
Posición de publicación: 10
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.404
Posición de publicación: 165
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 26
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 314
- 202** Dutta, D.; Nashre-ul-Islam, S. M.; Saha, U.; Frontera, A.; Bhattacharyya, M. K. Cu(II) and Co(II) coordination solids involving unconventional parallel nitrile(π)-nitrile(π) and energetically significant cooperative hydrogen bonding interactions: Experimental and theoretical studies. 907579 - Theochem-Journal of Molecular Structure. 1195, pp. 733 - 743. (Holanda): 2019. ISSN 0166-1280
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.06.040>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Tipo de soporte: Revista
- 203** Banerjee, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Methylene spacer regulated variation in molecular and crystalline architectures of cobalt(III) complexes with reduced Schiff base ligands: a combined experimental and theoretical study. 912705 - Dalton Transactions. (Reino Unido): 2019. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/c9dt01818b>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.174
Posición de publicación: 5
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 45
- 204** Navarro-García, E.; Velasco, M. D.; Zapata, F.; Bauza, A.; Frontera, A.; Ramírez de Arellano, C.; Caballero, A. Exploiting 1,4-naphthoquinone and 3-iodo-1,4-naphthoquinone motifs as anion binding sites by hydrogen or halogen-bonding interactions. 909714 - Theoretical Chemistry Accounts. (Alemania): 2019. ISSN 1432-881X
DOI: <https://doi.org/10.1039/c9dt02012h>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 5
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.498
Posición de publicación: 134
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 159
- 205** Carlos López; Bartomeu Galmés; Bartolomé Soberats; Antonio Frontera; Carmen Rotger; Antonio Costa. Surface Modification of Pseudoboehmite-Coated Aluminum Plates with Squaramic Acid Amphiphiles. 919226 - Acs Omega. 4 - 12, pp. 14868 - 14874. (Estados Unidos de América): 2019. Disponible en Internet en: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acsomega.9b01459>. ISSN 2470-1343

**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.87**Posición de publicación:** 81**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 177

- 206** Piña, María de las Nieves; Gutiérrez, María Susana; Panagos, Mario; Duel, Paulino; León, Alberto; Morey, Jeroni; Quiñonero, David; Frontera, Antonio. Influence of aromatic surface on the capacity of adsorption of VOCs by magnetite supported organic-inorganic hybrids. 917082 - Rsc Advances. 9 - 42, pp. 24184 - 24191. (Reino Unido): 2019. ISSN 2046-2069

DOI: <https://doi.org/10.1039/C9RA04490F>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/152328>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 8**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.119**Posición de publicación:** 73**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 177

- 207** Ghorai, P.; Brandão, P.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Saha, A. Anion-reliant structural versatility of novel cadmium(II) complexes: synthesis, crystal structures, photoluminescence properties and exploration of unusual O...S chalcogen bonding involving thiocyanate ligand. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 469, pp. 189 - 196. (Suiza): 2018. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2017.09.005>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.433**Posición de publicación:** 16**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 45

- 208** Hussain, M.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Lo, H. M.; Naseer, M. M. Structure guided or structure guiding? Mixed carbon/hydrogen bonding in a bis-Schiff base of N-allyl isatin. 912697 - Crystengcomm. 20, pp. 150 - 154. (Reino Unido): 2018. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7CE01697B>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.382**Posición de publicación:** 58**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 172**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.382**Posición de publicación:** 6**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 26

- 209** Ghosh, K.; Harms, K.; Bauza, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Heteronuclear Cobalt(III)/Sodium complexes with salen type compartmental Schiff base ligands: Methylene spacer regulated variation in nuclearity and exploration of σ/π -hole carbon bonding interactions. 912705 - Dalton Transactions. 47, pp. 331 - 347. (Reino Unido): 2018. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7DT03929H>

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.052**Posición de publicación:** 7**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45

- 210** Prohens, R.; Portell, A.; Vallcorba, O.; Font-Bardia, M.; Bauza, A.; Frontera, A. Polymorphism in secondary squaramides: on the importance of π -interactions involving the four membered ring. 912697 - Crystengcomm. 20, pp. 237 - 244. (Reino Unido): 2018. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7CE01945A>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.382**Posición de publicación:** 58**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 172**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.382**Posición de publicación:** 6**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 26

- 211** Panga, A.; Frontera, A. Valence tautomerism driven IPSO substitution in cobalt-bound tetrabromocatecholate ligands: Influence of positive charge at ligand backbone on phenoxazinone synthase activity. 910604 - European Journal of Inorganic Chemistry. 2018, pp. 924 - 931. (Desconocido): 2018. ISSN 1434-1948

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic.201701176>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 2**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.578**Posición de publicación:** 15**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 45

- 212** Prohens, R.; Portell, A.; Font-Bardia, M.; Bauzá A.; Frontera, A. H-Bonded anion-anion complex trapped in a squaramido-based receptor. 909184 - Chemical Communications. 54, pp. 1841. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2018. ISSN 1359-7345

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7CC09241E>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 4**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 6.164**Posición de publicación:** 32**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 172

- 213** Seth, S. K.; Bauzá, A.; Frontera, A. Screening polymorphism in Ni(II) metal-organic framework: Experimental observations, Hirshfeld surface analyses and DFT studies. 912697 - Crystengcomm. 20, pp. 746. (Reino Unido): 2018. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7CE01991B>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY



Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 58

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 6

Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26

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

DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules23010018>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.06
Posición de publicación: 136

Categoría: BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 298

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.06
Posición de publicación: 68

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172

- 215** Mahmoudi, G.; Zaręba, J. K.; Bauzá, A.; Kubicki, M.; Bartyzel, A.; Keramidias, A. D.; Butusov, L.; Mirosław, B.; Frontera, A. Recurrent supramolecular motifs in discrete complexes and coordination polymers based on mercury halides: Prevalence of chelate ring stacking and substituent effects. 912697 - Crystengcomm. 20, pp. 1065 - 1076. (Reino Unido): 2018. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7CE02166F>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 58

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 6

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26

- 216** Sarkar, N.; Drew, M. G. B.; Harms, K.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Methylene spacer regulated variation in conformation of tetradentate N2O2 donor Schiff bases trapped in manganese(III) complexes. 912697 - Crystengcomm. 20, pp. 1077. (Reino Unido): 2018. ISSN 1466-8033

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 58

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 6

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26

- 217** Pérez-Toro, I.; Domínguez-Martina, A.; Choquesillo-Lazarte, D.; García-Rubiño, M. E.; González-Pérez, J. M.; Castiñeiras, A.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Niclós-Gutiérrez, J. Copper(II) polyamine chelates as efficient receptors for acyclovir: syntheses, crystal structures and dft study. 900768 - Polyhedron. 145, pp. 218 - 226. (Reino Unido): 2018. ISSN 0277-5387
- Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- Posición de firma:** 0
- Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
- Índice de impacto:** 2.284 **Revista dentro del 25%:** No
- Posición de publicación:** 19 **Num. revistas en cat.:** 45
- Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY
- Índice de impacto:** 2.284 **Revista dentro del 25%:** No
- Posición de publicación:** 11 **Num. revistas en cat.:** 26
- 218** Mahapatra, P.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Drew, M. G. B.; Ghosh, A. Syntheses of four new asymmetric Schiff bases and their Cu(II) complexes: Theoretical calculations to rationalize the packing of molecules in the crystals. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 477, pp. 89 - 101. (Suiza): 2018. ISSN 0020-1693
- DOI:** <https://doi.org/10.1016/j.ica.2018.01.035>
- Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- Posición de firma:** 0
- Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
- Índice de impacto:** 2.433 **Revista dentro del 25%:** No
- Posición de publicación:** 16 **Num. revistas en cat.:** 45
- 219** Koner, A.; Sauerbrey, S.; Schnakenburg, G.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Streubel, R. Synthesis, Substitution, and Oxidation of Imidazole!2!thione Based Tricyclic 1,4!Dihydro!1,4!diphosphinines. 910604 - European Journal of Inorganic Chemistry. 2018, pp. 904 - 916. (Desconocido): 2018. ISSN 1434-1948
- DOI:** <https://doi.org/10.1002/ejic.201701338>
- Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- Posición de firma:** 0
- Nº total de autores:** 6
- Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
- Índice de impacto:** 2.578 **Revista dentro del 25%:** No
- Posición de publicación:** 15 **Num. revistas en cat.:** 45
- 220** Hossain, A.; Seth, S. K.; Bauzá, A.; Mukhopadhyay, S.; Frontera, A. Coordination Polymers Based on Phthalic Acid and Aminopyrazine Ligands: On the Importance of N-H... π Interactions. 917482 - Polymers. 10, pp. 182. (Suiza): 2018. ISSN 2073-4360
- DOI:** <https://doi.org/10.3390/polym10020182>
- Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- Posición de firma:** 0
- Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** POLYMER SCIENCE
- Índice de impacto:** 3.164 **Revista dentro del 25%:** Si
- Posición de publicación:** 17 **Num. revistas en cat.:** 87
- 221** Roy, S.; Drew, M. G. B.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Formation of a water-mediated assembly of two neutral copper(II) Schiff base fragments with a Cu₂(NCS)₄ moiety: exploration of non-covalent C-H... π (bimetallor ring) interactions. 912697 - Crystengcomm. 20, pp. 1679 - 1689. (Reino Unido): 2018. ISSN 1466-8033
- DOI:** <https://doi.org/10.1039/C7CE01473B>

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.382**Posición de publicación:** 58**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.382**Posición de publicación:** 6**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 172**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 26

- 222** Roy, S. Drew, M. G. B.; Bauzá, A.; Frontera, A. Chattopadhyay, S. Non-covalent tetrel bonding interactions in hemidirectional lead(II) complexes with nickel(II)-salen type metalloligands. 900672 - New Journal of Chemistry. 42, pp. 6062 - 6076. (Francia): 2018. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7NJ05148D>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.069**Posición de publicación:** 67**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 172

- 223** Singh, M. K.; Sutradhar, S.; Paul, B.; Adhikari, S.; Laskar, F.; Acharya, S.; Chakraborty, D.; Biswas, S.; Das, A.; Roy, S.; Frontera, A. Mixed-ligand complexes of zinc(II) with 1,1-dicyanoethylene-2,2-dithiolate and N-donor ligands: A combined experimental and theoretical study. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1164, pp. 334 - 343. (Holanda): 2018. ISSN 0022-2860

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2018.03.073>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.12**Posición de publicación:** 91**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 148

- 224** Martínez-Benito, C.; Bauzá, A.; Lago, A. B.; Ruiz-Pérez, C.; Jiménez, C. A.; Torres, M. E.; Frontera, A.; Pasán, J. Anion- π Interactions in Hollow Crystals of a Copper(II)-Cyamelurate Coordination Complex. 911335 - Crystal Growth & Design. 18, pp. 2636 - 2644. (Estados Unidos de América): 2018. ISSN 1528-7483

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.8b00305>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.153**Posición de publicación:** 48**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 172**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.153**Posición de publicación:** 3**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 26**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.153**Posición de publicación:** 66**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 293

- 225** Frontera, A.; Bauzá, A. Regium- π bonds: An Unexplored Link between Noble Metal Nanoparticles and Aromatic Surfaces. 908895 - Chemistry-A European Journal. 24, pp. 7228 - 7234. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2018. ISSN 0947-6539
DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201800820>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 5.16
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 37
Num. revistas en cat.: 172
- 226** Bauzá, A.; Frontera, A. Chalcogen 'like-like' Interactions Involving Trisulphide and Triselenide Compounds: A Combined CSD and Ab Initio Study. 910462 - Molecules. 23, pp. 699. (Suiza): MDPI, 2018. ISSN 1420-3049
DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules23030699>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 7
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY
Índice de impacto: 3.06
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 136
Num. revistas en cat.: 298

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 3.06
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 68
Num. revistas en cat.: 172
- 227** Konar, S.; Dey, A.; Ray, S.; Das, K.; Chatterjee, S.; Ray, P. P.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Two Zinc(II)-Based Metal Complexes of New Pyrimidine Derived Ligand: Anion-Dependent Structural Variations and Charge Transport Property Analysis. 914198 - Journal Of Physical Chemistry C. 122, pp. 8724 - 8734. (Estados Unidos de América): 2018. ISSN 1932-7447
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b11579>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Índice de impacto: 4.309
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 44
Num. revistas en cat.: 148

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 4.309
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 60
Num. revistas en cat.: 293

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY
Índice de impacto: 4.309
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 34
Num. revistas en cat.: 94
- 228** Bornhof, A.-B.; Bauzá, A.; Aster, A.; Pupier, M.; Frontera, A.; Vauthey, E.; Sakai, N.; Matile, S. Synergistic Anion-(π) π Catalysis on π -Stacked Foldamers. 900665 - Journal of the American Chemical Society. 140, pp. 4884 - 4892. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2018. ISSN 0002-7863
DOI: <https://doi.org/10.1021/jacs.8b00809>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 14.695
Posición de publicación: 12

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 172

- 229** Mahmoudi, G.; Seth, S. K.; Bauzá, A.; Zubkov, F. I.; Gurbanov, A. V.; White, J.; Stilinović, V.; Doert, T.; Frontera, A. Pb···X (X = N, S, I) tetrel bonding interactions in Pb(II) complexes: X-ray characterization, Hirshfeld surfaces and DFT calculations. 912697 - Crystengcomm. 20, pp. 2812. (Reino Unido): 2018. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C8CE00110C>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 58

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 6

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26

- 230** Maity, T.; Mandal, H.; Bauza, A.; Samanta, B. C.; Frontera, A.; Seth, S. K. Quantifying conventional C-H··· π (aryl) and unconventional C-H··· π (chelate) interactions in dinuclear Cu(II) complexes: Experimental observations, Hirshfeld surface and theoretical DFT study. 900672 - New Journal of Chemistry. 42, pp. 10202. (Francia): 2018. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/C8NJ00747K>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.069
Posición de publicación: 67

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172

- 231** Naseer, M. M.; Bauza, A.; Alnasr, H.; Jurkschat, K.; Frontera, A. Lone pair- π vs. σ -hole- π interactions in bromine head-containing oxalix[2]arene[2]triazines. 912697 - Crystengcomm. 20, pp. 3251 - 3257. (Reino Unido): 2018. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C8CE00666K>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 58

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 6

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26

- 232** Lopez-Andarias, J.; Bauza, A.; Sakai, N.; Frontera, A.; Matile, S. Remote Control of Anion- π Catalysis on Fullerene-Centered Catalytic Triads. 900624 - Angewandte Chemie-International Edition. 57, pp. 10883 - 10887. (Alemania): 2018. ISSN 1433-7851

DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.201804092>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 6

Nº total de autores: 5

Tipo de soporte: Revista



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 12.257
Posición de publicación: 17

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 172

- 233** Purkayastha, A.; Frontera, A.; Ganguly, R.; Misra, T. K. Synthesis, structures, and investigation of noncovalent interactions of 1,3-dimethyl-5-(4'/3'-pyridylazo)-6-aminouracil and their Ni(II) complexes. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1170, pp. 70 - 81. (Holanda): 2018. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2018.05.082>

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.12
Posición de publicación: 91

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 148

- 234** Seth, S. K.; Bauza, A.; Frontera, A. Bipolar behaviour of salt-bridges: a combined theoretical and crystallographic study. 900672 - New Journal of Chemistry. 42, pp. 12134 - 12142. (Francia): 2018. ISSN 1144-0546
DOI: <https://doi.org/10.1039/C8NJ02194E>

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.069
Posición de publicación: 67

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172

- 235** Purkait, S.; Chakraborty, P.; Frontera, A.; Bauza, A.; Zangrando, E.; Das, D. Zinc(II) complexes with uncommon aminated and hemiaminal ether derivatives: synthesis, structure, phosphatase activity and theoretical rationalization of ligand and complex formation. 900672 - New Journal of Chemistry. 42, pp. 12998 - 13009. (Francia): 2018. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/C8NJ01853G>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.069
Posición de publicación: 67

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172

- 236** Barbas, R.; Prohens, R.; Font-Bardia, M.; Bauza, A.; Frontera, A. Hydrogen bonding versus π -interactions: their key competition in sildenafil solvates. 912697 - Crystengcomm. 20, pp. 4526 - 4530. (Reino Unido): 2018. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C8CE00567B>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 58

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 6

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26

- 237** Purkayastha, A.; Debnath, D.; Majumder, M.; Ortega-Castro, J.; Kirillov, A. M.; Ganguly, R.; Klak, J.; Frontera, A.; Misra, T. K. Nickel(II) based homo- vs. heterometallic 1D coordination polymers derived from a novel 6-aminouracil building block: Structures, topologies, non-covalent interactions, magnetism, and antibacterial activity. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 482, pp. 384 - 394. (Suiza): 2018. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2018.06.037>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 2.433

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 16

Num. revistas en cat.: 45

- 238** Banerjee, S.; Dey, A.; Ghorai, P.; Brandao, P.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Ray, P. P.; Saha, A. Experimental and computational investigations of the photosensitive Schottky barrier diode property of an azobenzene based small organic molecule. 900672 - New Journal of Chemistry. 42, pp. 13430 - 13441. (Francia): 2018. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/C8NJ02193G>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 3.069

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 67

Num. revistas en cat.: 172

- 239** Andleeb, H.; Khan, I.; Bauza, A.; Tahir, M. N.; Simpson, J.; Hameed, S.; Frontera, A. A comparative experimental and theoretical investigation of hydrogen-bond, halogen-bond and π - π interactions in the solid-state supramolecular assembly of 2- and 4-formylphenyl arylsulfonates. 918332 - Acta Crystallographica Section C-Structural Chemistry. 74 - 7, pp. 816 - 829. (Reino Unido): 2018. ISSN 2053-2296

DOI: <https://doi.org/10.1107/S2053229618008355>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 0.93

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 138

Num. revistas en cat.: 172

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Índice de impacto: 0.93

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 21

Num. revistas en cat.: 26

- 240** Das, K.; Woyessa, W.; Datta, A.; Beyene, B. B.; Goswami, S.; Garribba, E.; Frontera, A.; Sinha, C. A Ni(II) derivative incorporating tetradentate Schiff base precursor: Structure, spectral, electrochemical and DFT interpretation. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1173, pp. 462 - 468. (Holanda): 2018. ISSN 0022-2860

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2018.07.027>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 2.12

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 91

Num. revistas en cat.: 148



- 241** Seth, S. K.; Bauza, A.; Mahmoudi, G.; Stilinovic, V.; Lopez-Torres, E.; Zaragoza, G.; Keramidas, A. D.; Frontera, A. On the importance of Pb...X (X = O, N, S, Br) tetrel bonding interactions in a series of tetra- and hexa-coordinated Pb(II) compounds. 912697 - Crystengcomm. 20, pp. 5033 - 5044. (Reino Unido): 2018. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/C8CE00919H>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 58
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 6
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26
- 242** Ghorai, P.; Brandao, P.; Bauza, A.; Frontera, A.; Saha, A. Synthesis of Multinuclear Zn(II) Complexes Involving 8-Aminoquinoline- Based Schiff-Base Ligand: Structural Diversity, DNA Binding Studies and Theoretical Calculations. 918593 - Chemistryselect. 3, pp. 7697 - 7706. (Alemania): 2018. ISSN 2365-6549
DOI: <https://doi.org/10.1002/slct.201801273>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.716
Posición de publicación: 107
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172
- 243** Garcia-Raso, A.; Terron, A.; Bauza, A.; Frontera, A.; Molina, J. J.; Vazquez-Lopez, E. M.; Fiol, J. J. Crystal structures of N6-modified-aminoacid/peptide nucleobase analogs: Hybrid adenine-glycine and adenine-glycylglycine molecules. 900672 - New Journal of Chemistry. 42, pp. 14742 - 14750. (Francia): 2018. ISSN 1144-0546
DOI: <https://doi.org/10.1039/C8NJ02147C>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.069
Posición de publicación: 67
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172
- 244** Das, M.; Craig, G. A.; Escudero, D.; Murrie, M.; Frontera, A.; Ray, D. A family of [Cu₂], [Cu₄] and [Cu₅] aggregates: alteration of reaction conditions, ancillary bridges and capping anions. 900672 - New Journal of Chemistry. 42, pp. 14349 - 14364. (Francia): 2018. ISSN 1144-0546
DOI: <https://doi.org/10.1039/C8NJ02131G>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.069
Posición de publicación: 67
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172
- 245** Ghosh, K.; Banerjee, A.; Bauza, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. One pot synthesis of two cobalt(III) Schiff base complexes with chelating pyridyltetrazolate and exploration of their bio-relevant catalytic activities. 917082 - Rsc Advances. 8, pp. 28216 - 28237. (Reino Unido): 2018. ISSN 2046-2069
DOI: <https://doi.org/10.1039/C8RA03035A>

**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.049**Posición de publicación:** 69**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 172

- 246** Hossain, A.; Dey, A.; Seth, S. K.; Ray, P. P.; Ballester, P.; Pritchard, R. G.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Enhanced Photosensitive Schottky Diode Behavior of Pyrazine over 2-Aminopyrimidine Ligand in Copper(II)-Phthalate MOFs: Experimental and Theoretical Rationalization. 919226 - Acs Omega. 3, pp. 9160 - 9171. (Estados Unidos de América): 2018. ISSN 2470-1343

DOI: <https://doi.org/10.1021/acsomega.8b01111>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2,584**Posición de publicación:** 76**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 172

- 247** Kumar, M.; Kariem, M.; Sheikh, H. N.; Frontera, A.; Seth, S. K.; Jassal, A. K. A series of 3D lanthanide coordination polymers decorated with a rigid 3,5-pyridinedicarboxylic acid linker: syntheses, structural diversity, DFT study, Hirshfeld surface analysis, luminescence and magnetic properties. 912705 - Dalton Transactions. 47, pp. 12318 - 12336. (Reino Unido): 2018. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C8DT02429D>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.052**Posición de publicación:** 7**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45

- 248** 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. (Alemania): 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>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 5.16**Posición de publicación:** 37**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 172

- 249** Cougnon, F. B. L.; Caprice, K.; Pupier, M.; Bauza, A.; Frontera, A. A Strategy to Synthesize Molecular Knots and Links Using the Hydrophobic Effect. 900665 - Journal of the American Chemical Society. 140, pp. 12442 - 12450. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2018. ISSN 0002-7863

DOI: <https://doi.org/10.1021/jacs.8b05220>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 14.695**Posición de publicación:** 12**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 172

- 250** Escudero-Adan, E. C.; Bauza, A.; Lecomte, C.; Frontera, A.; Ballester, P. Boron triel bonding: a weak electrostatic interaction lacking electron-density descriptors. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 20, pp. 24192 - 24200. (Reino Unido): 2018. ISSN 1463-9076
DOI: <https://doi.org/10.1039/c8cp04401e>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.567
Posición de publicación: 55
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.567
Posición de publicación: 9
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 148
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 36
- 251** Llorente, N.; Fernandez-Perez, H.; Bauza, A.; Frontera, A.; Vidal-Ferran, A. Ni-Catalysed Intramolecular [4+4]-cycloadditions of bis-dienes towards eight-membered fused bicyclic systems: a combined experimental and computational study. 917075 - Catalysis Science & Technology. 8, pp. 5251 - 5258. (Reino Unido): 2018. ISSN 2044-4753
DOI: <https://doi.org/10.1039/c8cy00684a>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.726
Posición de publicación: 32
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 148
- 252** Dutta, S.; Jana, S.; Mahapatra, P.; Bauza, A.; Frontera, A.; Ghosh, A. Joining of trinuclear (CuL)₂M (M = MnII and CdII) nodes by 1,3- and 1,4-benzenedicarboxylate linkers: positional isomeric effect on co-crystallization. 912697 - Crystengcomm. 20, pp. 6490 - 6501. (Reino Unido): 2018. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/c8ce01168k>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 58
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 6
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26
- 253** Naseer, M. M.; Hussain, M.; Bauza, A.; Lo, K. M.; Frontera, A. Intramolecular Noncovalent Carbon Bonding Interaction Stabilizes the cis Conformation in Acylhydrazones. 917523 - Chempluschem. 83, pp. 881 - 885. (Alemania): 2018. ISSN 2192-6506
DOI: <https://doi.org/10.1002/cplu.201800329>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.441
Posición de publicación: 57
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172

- 254** Saha, S.; Biswas, N.; Sasmal, A.; Gomez-Garcia, C. J.; Garribba, E.; Bauza, A.; Frontera, A.; Pilet, G.; Rosair, G. M.; Mitra, S.; Roy Choudhury, C. Effect of temperature and ligand protonation on the electronic ground state in Cu(II) polymers having unusual secondary interactions: a magnetic and catechol oxidase study. 912705 - Dalton Transactions. 47, pp. 16102. (Reino Unido): 2018. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/c8dt02417k>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.052
Posición de publicación: 7
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 45
- 255** Castineiras, A.; Garcia-Santos, I.; Gonzalez-Perez, J. M.; Bauza, A.; Zareba, J. K.; Niclos-Gutierrez, J.; Torres, R.; Vilchez, E.; Frontera, A. Multicomponent Supramolecular Assemblies of Melamine and α -Hydroxycarboxylic Acids: Understanding the Hydrogen Bonding Patterns and Their Physicochemical Consequences. 911335 - Crystal Growth & Design. 18, pp. 6786 - 6800. (Estados Unidos de América): 2018. ISSN 1528-7483
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.cgd.8b01035>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.153
Posición de publicación: 48
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.153
Posición de publicación: 3
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.153
Posición de publicación: 66
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 293
- 256** Ghosh, K.; Harms, K.; Bauza, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. σ -Hole halogen bonding interactions in a mixed valence cobalt(III/II) complex and anti-electrostatic hydrogen bonding interaction in a cobalt(III) complex: a theoretical insight. 912697 - Crystengcomm. 20, pp. 7281 - 7292. (Reino Unido): 2018. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/c8ce01323c>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 58
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 172
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.382
Posición de publicación: 6
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26
- 257** Majumder, I.; Chakraborty, P.; Alvarez, R.; Gonzalez-Diaz, M.; Pelaez, R.; Ellahioui, Y.; Bauza, A.; Frontera, A.; Zangrando, E.; Gomez-Ruiz, S.; Das, D. Bioactive Heterometallic CuI-ZnII Complexes with Potential Biomedical Applications. 919226 - Acs Omega. 3, pp. 13343 - 13353. (Estados Unidos de América): 2018. ISSN 2470-1343
DOI: <https://doi.org/10.1021/acsomega.8b01260>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista

**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2,584**Posición de publicación:** 76**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 172

- 258** Naskar, B.; Bauza, A.; Frontera, A.; Maiti, D. K.; Das Mukhopadhyay, C.; Goswami, S. A versatile chemosensor for the detection of Al³⁺ and picric acid (PA) in aqueous solution. 912705 - Dalton Transactions. 47, (Reino Unido): 2018. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/c8dt02289e>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.052**Posición de publicación:** 7**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45

- 259** Bauza, A.; Frontera, A. Tetrel bonding interactions in perchlorinated cyclopenta- and cyclohexatetrelanes: a combined DFT and CSD study. 910462 - Molecules. 23, pp. 1770. (Suiza): MDPI, 2018. ISSN 1420-3049

DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules23071770>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.06**Posición de publicación:** 136**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 298**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.06**Posición de publicación:** 68**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 172

- 260** Mahmoudi, G.; Khandar, A.A.; Afkhami, F. A.; Miroslaw, B.; Gurbanov, A. V.; Zubkov, F. I.; Kennedy, A.; Franconetti, A.; Frontera, A. Modulation of coordination in pincer-type isonicotinohydrazone Schiff base ligands by proton transfer. 912697 - Crystengcomm. 20, (Reino Unido): 2018. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/c8ce01580e>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.382**Posición de publicación:** 58**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 172**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.382**Posición de publicación:** 6**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 26

- 261** Frontera, A.; Bauza, A. S...Sn Tetrel Bonds in the Activation of Peroxisome Proliferator-Activated Receptors (PPARs) by Organotin Molecules. 908895 - Chemistry-A European Journal. 24, (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2018. ISSN 0947-6539

DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201804676>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 5.16**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si

Posición de publicación: 37

Num. revistas en cat.: 172

- 262** Derakhshanrad, S.; Mirzaei, M.; Najafi, A.; Ritchie, C.; Bauza, A.; Frontera, A.; Mague, J. T. Surface-grafted lanthanoid complexes of the tungstosilicate polyanion [SiW₁₂O₄₀]⁴⁻: a synthetic, structural and computational investigation. 918332 - Acta Crystallographica Section C-Structural Chemistry. 74, pp. 1300 - 1309. (Reino Unido): 2018. ISSN 2053-2296

DOI: <https://doi.org/10.1107/s2053229618009580>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 0.93

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 138

Num. revistas en cat.: 172

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Índice de impacto: 0.93

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 21

Num. revistas en cat.: 26

- 263** Zhang, X.; Hao, X.; Liu, L.; Pham, A.; Lopez-Andarias, J.; Frontera, A.; Sakai, N.; Matile, S. Primary Anion- π Catalysis and Autocatalysis. 900665 - Journal of the American Chemical Society. 140, pp. 17867 - 17871. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2018. ISSN 0002-7863

DOI: <https://doi.org/10.1021/jacs.8b11788>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 14.695

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 12

Num. revistas en cat.: 172

- 264** Das, K.; Goswami, S.; Beyene, B.; Yibeltal, A.; Garribba, E.; Frontera, A.; Datta, A. EPR, DFT and electrochemical interpretation of a Cu(II) derivative incorporating a Schiff base precursor. 900768 - Polyhedron. 159, pp. 323 - 329. (Reino Unido): 2018. ISSN 0277-5387

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2018.11.058>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 2.284

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 19

Num. revistas en cat.: 45

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Índice de impacto: 2.284

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 11

Num. revistas en cat.: 26

- 265** Saha, U.; Dutta, D.; Bauza, A.; Frontera, A.; Sarma, B.; Bhattacharyya, M. Werner type clathrates involving guest benzoic acid and benzoate in discrete Mn(II) hosts: Experimental and theoretical studies. 900768 - Polyhedron. 159, pp. 383 - 389. (Reino Unido): 2018. ISSN 0277-5387

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2018.11.068>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 2.284

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 19

Num. revistas en cat.: 45

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.284
Posición de publicación: 11

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 26

- 266** Jana, S.; Khan, S.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. The crucial role of chelate-chelate stacking interactions in the crystal structure of a square planar copper(II) complex. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1127, pp. 355 - 360. (Holanda): 2017. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2016.07.062>

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.011
Posición de publicación: 86

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 147

- 267** Naskar, B.; Modak, R.; Sikdar, Y.; Maiti, D. K.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Katarkar, A.; Chaudhuri, K.; Goswami, S. Fluorescent sensing of Al³⁺ by benzophenone based Schiff base chemosensor and live cell imaging applications: Impact of keto-enol tautomerism. 901385 - Sensors and Actuators B-Chemical. 239, pp. 1194 - 1204. (Suiza): 2017. ISSN 0925-4005
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.snb.2016.08.148>

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.667
Posición de publicación: 7

Categoría: CHEMISTRY, ANALYTICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 81

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.667
Posición de publicación: 4

Categoría: ELECTROCHEMISTRY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 28

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.667
Posición de publicación: 2

Categoría: INSTRUMENTS & INSTRUMENTATION
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 61

- 268** Roy, S.; Harms, K.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Exploration of photocatalytic activity of an end-on azide bridged one-dimensional cadmium(II) Schiff base complex for the degradation of organic dye in visible light. 900768 - Polyhedron. 121, pp. 199 - 205. (Reino Unido): 2017. ISSN 0277-5387
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2016.09.018>

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.067
Posición de publicación: 18

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 45

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.067
Posición de publicación: 14

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 26

- 269** Dasgupta, S.; Majumder, I.; Chakraborty, P.; Zangrando, E.; Bauza, A.; Frontera, A.; Das, D. Ligand Flexibility Controlled and Solvent Induced Nuclearity Conversion in Cu(II)-Based Catecholase Models: A Deep Insight by Combined Experimental and Theoretical Investigations. 910604 - European Journal of Inorganic Chemistry. 2017, pp. 133 - 145. (Desconocido): 2017. ISSN 1434-1948

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic.201600985>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.507

Posición de publicación: 14

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 45

- 270** Mahmoudi, G.; Zangrando, E.; Kaminsky, W.; Garczarek, P.; Frontera, A. Solvent dependent nuclearity of manganese complexes with a polydentate hydrazone-based ligand and thiocyanate anions. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 455, pp. 204 - 212. (Suiza): 2017. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2016.10.028>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.264

Posición de publicación: 16

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 45

- 271** Khan, S.; Chattopadhyay, S.; Al Masum, A.; Islam, M. M.; Drew, M. G. B.; Bauzá, A.; Frontera, A. Observation of π -hole interactions in the solid state structures of three new copper(II) complexes with a tetradentate N4 donor Schiff base: Exploration of their cytotoxicity against MDA-MB 468 cells. 900768 - Polyhedron. 123, pp. 334 - 343. (Reino Unido): 2017. ISSN 0277-5387

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2016.11.012>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.067

Posición de publicación: 18

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 45

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.067

Posición de publicación: 14

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 26

- 272** Escudero, E. C.; Bauza, A.; Hernandez-Eguia, L. P.; Wurthner, F.; Ballester, P.; Frontera, A. Solid-state Inclusion of C60 and C70 in a Co-polymer Induced by Metal-Ligand Coordination of a Zn-Porphyrin Cage with a bis-pyridyl Perylene Derivative. 912697 - Crystengcomm. 19, pp. 4911 - 4919. (Reino Unido): 2017. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C6CE02341J>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 6

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.304

Posición de publicación: 62

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 171

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.304

Posición de publicación: 8

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 26

- 273** Murcia García, C.; Bauza, A.; Schnakenburg, G.; Frontera, A.; Streubel, R. Ambiguous reactivity of Li/Cl phosphinidenoid complexes under redox conditions - a novel dichotomy in phosphorus chemistry. 909184 - Chemical Communications. 53, pp. 933 - 936. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2017. ISSN 1359-7345
DOI: <https://doi.org/10.1039/c6cc09620d>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 4

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 6.29

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 28

Num. revistas en cat.: 171

- 274** Terrón, A.; Moreno-Vachiano, B.; Bauzá, A.; García-Raso, A.; Fiol, J. J.; Barceló-Oliver, M.; Molins, E.; Frontera, A. X-ray Crystal Structure of a Metalled Double-Helix Generated by Infinite and Consecutive C*-AgI-C* (C*: N1-Hexylcytosine) Base Pairs through Argentophilic and Hydrogen Bond Interactions. 908895 - Chemistry-A European Journal. 23 - 9, pp. 2103 - 2108. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2017. ISSN 0947-6539
DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201604331>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 5.16

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 37

Num. revistas en cat.: 171

- 275** Jana, N. Ch.; Pramanik, K.; Bauzá, A.; Brandão, P.; Patra, M.; Frontera, A.; Panja, A. Pseudohalides regulated diverse helicity in copper(II) coordination polymers derived from a bis(aminoethoxy) ligand. 900768 - Polyhedron. 124, pp. 262 - 274. (Reino Unido): 2017. ISSN 0277-5387
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2016.12.042>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 2.067

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 18

Num. revistas en cat.: 45

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Índice de impacto: 2.067

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 14

Num. revistas en cat.: 26

- 276** Halder, S.; Mondal, J.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Roy, P. A Ni-based MOF for selective detection and removal of Hg²⁺ in aqueous medium: a facile strategy. 912705 - Dalton Transactions. 46, pp. 1943. (Reino Unido): 2017. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C6DT04722J>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 4.099

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 6

Num. revistas en cat.: 45

- 277** Mitra, M.; Hossain, A.; Manna, P.; Choudhury, S. R.; Kaenket, S.; Helliwell, M.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Melamine mediated self-assembly of a Cu(II)-methylmalonate complex assisted by π - π and anti-electrostatic H-bonding interactions. 900755 - Journal of Coordination Chemistry. 70, pp. 463 - 474. (Reino Unido): 2017. ISSN 0095-8972
DOI: <https://doi.org/10.1080/00958972.2016.1277709>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Índice de impacto: 1.703 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 26 **Num. revistas en cat.:** 45
- 278** Das, K.; Patra, C.; Sen, C.; Amitabha Datta, A.; Massera, C.; Eugenio Garribba, E.; Salah El Fallah, M.; Beyene, B. B.; Hung, C.-H.; Sinha, C.; Askun, T.; Celikboyun, P.; Escudero, D.; Frontera, A. EPR interpretation, magnetism and biological study of a Cu(II) dinuclear complex assisted by a schiff base precursor. 909282 - Journal of Biological Inorganic Chemistry. 22, pp. 481 - 495. (Estados Unidos de América): 2017. ISSN 0949-8257
DOI: <https://doi.org/10.1007/s00775-016-1428-x>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY
Índice de impacto: 2.952 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 144 **Num. revistas en cat.:** 293

Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Índice de impacto: 2.952 **Revista dentro del 25%:** Si
Posición de publicación: 11 **Num. revistas en cat.:** 45
- 279** Yogendra, S.; Hennersdorf, F.; A. Bauzá, A.; Frontera, A.; Fischer, R.; Weigand, J. J. Carbodiphosphorane mediated synthesis of a triflyloxyphosphonium dication and its reactivity towards nucleophiles. 909184 - Chemical Communications. 53, pp. 2954. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2017. ISSN 1359-7345
DOI: <https://doi.org/10.1039/C7CC00982H>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 4
Nº total de autores: 5
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 6.29 **Revista dentro del 25%:** Si
Posición de publicación: 28 **Num. revistas en cat.:** 171
- 280** Chattopadhyay, K.; Craig, G. A.; Heras Ojea, M. J.; Pait, M.; Kundu, A.; Lee, J.; Murrie, M.; Frontera, A.; Ray, D. Dangling and Hydrolyzed Ligand Arms in [Mn3] and [Mn6] Coordination Assemblies: Synthesis, Characterization, and Functional Activity. 900752 - Inorganic Chemistry. 56 - 5, pp. 2639 - 2652. (Estados Unidos de América): 2017. ISSN 0020-1669
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.6b02813>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Índice de impacto: 4.7 **Revista dentro del 25%:** Si
Posición de publicación: 5 **Num. revistas en cat.:** 45

- 281** Panja, A.; Jana, N. Ch.; Adak, S.; Mwanja, T. M.; Eichhorn, D. M.; Bauza, A.; Frontera, A. Introducing Supramolecular Interactions into Robust Bis(tetrabromocatecholate) Chelated Manganese(III) Systems and Biomimetic Catalytic Activity. 918593 - Chemistryselect. 2, pp. 2094. (Alemania): 2017. ISSN 2365-6549
DOI: <https://doi.org/10.1002/slct.201602007>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 1.505 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 106 **Num. revistas en cat.:** 171
- 282** Naskar, B.; Modak, R.; K. Maiti, D.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Kumar Maiti, P.; Mandal, S.; Goswami, S. A highly selective 'ON-OFF' probe for colorimetric and fluorometric sensing of Cu²⁺ in water. 917082 - Rsc Advances. 7, pp. 11312. (Reino Unido): 2017. ISSN 2046-2069
DOI: <https://doi.org/10.1039/C6RA27017D>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 2.936 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 71 **Num. revistas en cat.:** 171
- 283** Afkhami, F. A.; Khandar, A. A.; Mahmoudi, G.; Maniukiewicz, W.; Gurbanov, A. V.; Zubkov, F. I.; Şahin, O.; Yesilel, O. Z.; Frontera, A. Chelate ring stacking interactions in the supramolecular assemblies of Zn(II) and Cd(II) coordination compounds: a combined experimental and theoretical study. 912697 - Crystengcomm. 19, pp. 1389 - 1399. (Reino Unido): 2017. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/C6CE02666D>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 6
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 3.304 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 62 **Num. revistas en cat.:** 171
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY
Índice de impacto: 3.304 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 8 **Num. revistas en cat.:** 26
- 284** Tehrani, A. A.; Ghasempour, H.; Morsali, A.; Bauza, A.; Frontera, A.; Retailleau, P. Unraveling the Dual Character of Sulfur Atoms in a series of Hg(II) coordination polymers containing bis(4-pyridyl)disulfide. 912697 - Crystengcomm. 19, pp. 1974. (Reino Unido): 2017. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/C7CE00033B>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 6
Nº total de autores: 5
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 3.304 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 62 **Num. revistas en cat.:** 171
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY
Índice de impacto: 3.304 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 8 **Num. revistas en cat.:** 26

- 285** Saha, S.; Choudhury, C. R.; Pilet, G.; Frontera, A.; Mitra, S. Design of end-on cyanato bridged trinuclear Cu(II) Schiff base complex with salen type Schiff base ligand: synthesis, structural investigation and DFT study. 900755 - Journal of Coordination Chemistry. 70, pp. 1389 - 1405. (Reino Unido): 2017. ISSN 0095-8972
DOI: <https://doi.org/10.1080/00958972.2017.1287354>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Índice de impacto: 1.703 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 26 **Num. revistas en cat.:** 45
- 286** Saha, S.; Choudhury, C. R.; Gómez-García, C. J.; Garribba, E.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Pilet, G.; Mitra, S. Magneto-structural and theoretical study of the weak interactions in a Mn(II) complex with a very unusual N,O-chelating coordination mode of 2-aminoterephthalate. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 461, pp. 183 - 191. (Suiza): 2017. ISSN 0020-1693
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2017.02.016>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Índice de impacto: 2.264 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 16 **Num. revistas en cat.:** 45
- 287** Bauza, A.; Frontera, A.; Mooibroek, T. J. NO₃⁻ anions can act as Lewis acid in the solid state. 916151 - Nature Communications. 8, pp. 14522. (Reino Unido): 2017. ISSN 2041-1723
DOI: <https://doi.org/10.1038/ncomms14522>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** MULTIDISCIPLINARY SCIENCES
Índice de impacto: 12.353 **Revista dentro del 25%:** Si
Posición de publicación: 3 **Num. revistas en cat.:** 64
- 288** Bauzá, A.; Frontera, A. Competition between lone pair- π , halogen- π and triel bonding interactions involving BX₃ (X = F, Cl, Br and I) compounds: an ab initio study. 909714 - Theoretical Chemistry Accounts. 136, pp. 37. (Alemania): 2017. ISSN 1432-881X
DOI: <https://doi.org/10.1007/s00214-017-2068-0>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 2
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL
Índice de impacto: 1.545 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 106 **Num. revistas en cat.:** 147
- 289** Bauzá, A.; Frontera, A. On the importance of pi-Hole beryllium bonds: Theoretical study and biological implications. 908895 - Chemistry-A European Journal. 23 - 22, pp. 5375. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2017. ISSN 0947-6539
DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201700682>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 2



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.16
Posición de publicación: 37

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 171

- 290** Bauza, A.; Sharko, A. V.; Senchyk, G.; Rusanov, E. B.; Frontera, A.; Domasevitch, K. V. π -Hole interactions at work: crystal engineering with nitro-derivatives. 912697 - Crystengcomm. 19, pp. 1933. (Reino Unido): 2017. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7CE00267J>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 6

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.304

Posición de publicación: 62

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 171

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.304

Posición de publicación: 8

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 26

- 291** Andleeb, H.; Khan, I.; Bauzá, A.; Tahir, M. N.; Simpson, J.; Hameed, S.; Frontera, A. Synthesis and supramolecular self-assembly of thioxothiazolidinone derivatives driven by H-bonding and diverse π -hole interactions: A combined experimental and theoretical analysis. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1139, pp. 209 - 221. (Holanda): 2017. ISSN 0022-2860

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2017.03.046>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.011

Posición de publicación: 86

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 147

- 292** Roy, S.; Drew, M. G. B.; Bauza, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Estimation of conventional C-H $\cdots\pi$ (arene), unconventional C-H $\cdots\pi$ (chelate) and C-H $\cdots\pi$ (thiocyanate) interactions in hetero-nuclear nickel-cadmium complexes with a compartmental Schiff base: Novel example of a diamine bridged hetero-polynuclear complex having NiO₂Cd core. 912705 - Dalton Transactions. 46, pp. 5384. (Reino Unido): 2017. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C6DT04906K>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.099

Posición de publicación: 6

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 45

- 293** Dasgupta, S.; Adhikary, J.; Giri, S.; Bauza, A.; Frontera, A.; Das, D. Unveiling the effects of in situ generated arene anion radical and imine radical on catecholase like activity: A DFT supported experimental investigation. 912705 - Dalton Transactions. 46, pp. 5888. (Reino Unido): 2017. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7DT00733G>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.099

Posición de publicación: 6

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 45



- 294** Ghosh, B. N.; Schlecht, S.; Bauza, A.; Frontera, A. Mononuclear and dinuclear trimethylplatinum (IV) iodide complexes of 3-substituted pyridines. 900672 - New Journal of Chemistry. 41, pp. 3498 - 3507. (Francia): 2017. ISSN 1144-0546
DOI: <https://doi.org/10.1039/C7NJ00337D>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.201
Posición de publicación: 65
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 171
- 295** Bauza, A.; Frontera, A. Supramolecular nanotubes based on halogen bonding interactions: cooperativity and interaction with small guests. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 19, pp. 12936. (Reino Unido): 2017. ISSN 1463-9076
DOI: <https://doi.org/10.1039/C7CP01724C>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.906
Posición de publicación: 46
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.906
Posición de publicación: 9
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 147
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 37
- 296** Arefian, M.; Mirzaei, M.; Eshtiagh-Hosseini, H.; Frontera, A. A survey of different roles of polyoxometalates in their interaction with amino acids, peptides and proteins. 912705 - Dalton Transactions. 49, pp. 6812. (Reino Unido): 2017. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/C7DT00894E>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.099
Posición de publicación: 6
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 45
- 297** Sarkar, N.; Harms, K.; Bauza, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Synthesis, Characterization, DFT Study, Catechol Oxidase and Phenoxazinone Synthase Like Activities of Two New Manganese (IV) Schiff Base Complexes. 918593 - ChemistrySelect. 2 - 10, pp. 2975 - 2984. (Alemania): 2017. ISSN 2365-6549
DOI: <https://doi.org/10.1002/slct.201601664>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.505
Posición de publicación: 106
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 171
- 298** Prohens, R.; Portell, A.; Font-Bardia, M.; Bauza, A.; Frontera, A. A combined crystallographic and theoretical study of weak intermolecular interactions in crystalline squaric acid esters and amides. 912697 - CrystEngComm. 19, pp. 3071. (Reino Unido): 2017. ISSN 1466-8033

**DOI:** <https://doi.org/10.1039/c7ce00556c>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 6**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.304**Posición de publicación:** 62**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.304**Posición de publicación:** 8**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 171**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 26

- 299** Schwedtmann, K.; Hennersdorf, F.; Bauza, A.; Frontera, A.; Fischer, R.; Weigand, J. J. Isolation of Azadiphosphiridines and Diphosphenimines by Cycloaddition of Azides and a Cationic Diphosphene. 900624 - Angewandte Chemie-International Edition. 56, pp. 6218 - 6222. (Alemania): 2017. ISSN 1433-7851

DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.201702058>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 6**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 12.102**Posición de publicación:** 14**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 171

- 300** Yogendra, S.; Hennersdorf, F.; Bauza, A.; Frontera, A.; Fischer, R.; Weigand, J. J. Selective and Reversible Fluoride Complexation from Water by a Cyclic Tri(phosphonio)methanide Dication. 900624 - Angewandte Chemie-International Edition. 56, pp. 7907. (Alemania): 2017. ISSN 1433-7851

DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.201701570>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 4**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 12.102**Posición de publicación:** 14**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 171

- 301** Mahmoudi, G.; Zangrando, E.; Bauza, A.; Maniukiewicz, W.; Carballo, R.; Gurbanov, A. V.; Frontera, A. Molecular and crystalline architectures based on HgI₂: from metallamacrocycles to coordination polymers. 912697 - Crystengcomm. 19, pp. 3322. (Reino Unido): 2017. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/c7ce00628d>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 7**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.304**Posición de publicación:** 62**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.304**Posición de publicación:** 8**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 171**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 26

- 302** Saha, S.; Roy Choudhury, C.; Gomez Garcia, C. J.; Benmansour, S.; Garribba, E.; Frontera, A.; Rizzoli, C.; Mitra, S. Trigonal prismatic anionic iron (III) complex of a radical o-imino-benzo-semiquinonate derivative: Structural and spectral analysis. 900672 - New Journal of Chemistry. 41, pp. 7283 - 7291. (Francia): 2017. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/c7nj01212h>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 3.201

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 65

Num. revistas en cat.: 171

- 303** Hossain, A.; Mandal, T.; Mitra, M.; Manna, P.; Bauza, A.; Frontera, A.; Seth, S. K.; Mukhopadhyay, S. Exploring 3D non-interpenetrated metal-organic framework with malonate-bridged Co(II) coordination polymer: structural elucidation and theoretical study. 900951 - Phase Transitions. 90, pp. 1193 - 1204. (Estados Unidos de América): 2017. ISSN 0141-1594

DOI: <https://doi.org/10.1080/01411594.2017.1326603>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Índice de impacto: 1.028

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 20

Num. revistas en cat.: 26

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: PHYSICS, CONDENSED MATTER

Índice de impacto: 1.028

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 55

Num. revistas en cat.: 67

- 304** Bauza, A.; Frontera, A. On the importance of nonbonding donor-acceptor interactions involving PO₂^{*} radical: An ab initio study. 910825 - Chemphyschem. 18, pp. 2191. (Alemania): 2017. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.201700399>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 2.947

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 62

Num. revistas en cat.: 147

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Índice de impacto: 2.947

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 11

Num. revistas en cat.: 37

- 305** Kariem, M.; Yawer, M.; Kumar, M.; Sheikh, H. N.; Sood, P.; Frontera, A.; Ortega-Castro, J. Supramolecular coordination polymers of La(III), Ce(III), Sm(III), Gd(III) and Eu(III) decorated with rigid 5-hydroxy-1,3-benzenedicarboxylate and flexible hexane-1,6-dicarboxylate linkers: Syntheses, structures, DFT study, luminescence and magnetic properties. 900768 - Polyhedron. 134, pp. 153 - 165. (Reino Unido): 2017. ISSN 0277-5387

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2017.06.014>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 2.067

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 18

Num. revistas en cat.: 45

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.067**Posición de publicación:** 14**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 26

- 306** Elena Sanna; Antonio Bauzá; Eduardo C. Escudero-Adán; Carmen Rotger; Antonio Frontera; Antonio Costa. The Mouse in a trap: observation of a C(sp³)-F₂C-F-C(sp³) interaction in a discrete CFC pair by the crystal sponge method. 911335 - Crystal Growth & Design. 17 - 7, pp. 3611 - 3615. (Estados Unidos de América): 2017. ISSN 1528-7483

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.972**Posición de publicación:** 46**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 171**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.972**Posición de publicación:** 6**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 26**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.972**Posición de publicación:** 60**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 285

- 307** Naskar, B.; Modak, R.; Maiti, D. K.; Drew, M. G. B.; Bauza, A.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, C. D.; Mishra, S.; Saha, K. D.; Goswami, S. A Schiff base platform: structures, sensing of Zn(II), PPI in aqueous medium and anticancer activity. 912705 - Dalton Transactions. 46, pp. 9498. (Reino Unido): 2017. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7DT01932G>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.099**Posición de publicación:** 6**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45

- 308** Bauza, A.; Frontera, A. On the Importance of Halogen-Halogen Interactions in the Solid State of Fullerene Halides: A Combined Theoretical and Crystallographic Study. 918343 - Crystals. 7, pp. 191. (Suiza): 2017. ISSN 2073-4352

DOI: <https://doi.org/10.3390/cryst7070191>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2,144**Posición de publicación:** 13**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 26**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2,144**Posición de publicación:** 136**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 285

- 309** Garcia-Llinás, X.; Bauza, A.; Seth, S. K.; Frontera, A. On the Importance of R-CF₃...O Tetrel Bonding Interactions in Biological Systems. 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 121, pp. 5371 - 5376. (Estados Unidos de América): 2017. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.7b06052>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.836

Posición de publicación: 69

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.836

Posición de publicación: 14

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 147

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 37

- 310** Bauza, A.; Seth, S. K.; Frontera, A. Molecular electrostatic potential and 'atoms-in-molecules' analyses of the interplay between π -hole and lone pair $\cdots\pi$ /X-H $\cdots\pi$ /metal $\cdots\pi$ interactions. 900660 - Journal of Computational Chemistry. pp. 458 - 463. (Estados Unidos de América): 2017. ISSN 0192-8651

DOI: <https://doi.org/10.1002/jcc.24869>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.221

Posición de publicación: 63

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 171

- 311** Naskar, B.; Maiti, D. K.; Bauza, A.; Frontera, A.; Prodhan, C.; Keya Chaudhuri, K.; Goswami, S. Synthetic Modulation of a Chemosensor Affords Target Metal Ion Switch from Zn²⁺ to Al³⁺. 918593 - Chemistryselect. 2, pp. 5414 - 5420. (Alemania): 2017. ISSN 2365-6549

DOI: <https://doi.org/10.1002/slct.201700861>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.505

Posición de publicación: 106

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 171

- 312** Montis, R.; Arca, M.; Aragoni, M. C.; Bauzá, A.; Demartin, F.; Frontera, A.; Isaia, F.; Lippolis, V. Hydrogen- and halogen-bond cooperativity in determining the crystal packing of dihalogen charge-transfer adducts: a study case from heterocyclic pentatomic chalcogenone donors. 912697 - Crystengcomm. 19, pp. 4401. (Reino Unido): 2017. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/c7ce01035d>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 7

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.304

Posición de publicación: 62

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 171

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.304

Posición de publicación: 8

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 26

- 313** Thakur, S.; Roy, S.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Estimation of non-covalent CH $\cdots$ π , $\pi\cdots\pi$ (chelate ring) and hydrogen bonding interactions in vanadium(V) Schiff base complexes: Methylene spacer regulated variation in self-assembly. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 467, pp. 212 - 220. (Suiza): 2017. ISSN 0020-1693
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2017.07.056>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.264
Posición de publicación: 16
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 45
- 314** Halder, S.; Dey, A.; Bhattacharjee, A.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Ray, P. P.; Roy, P. A Cd(II)-based MOF as a photosensitive Schottky diode: experimental and theoretical studies. 912705 - Dalton Transactions. 46, pp. 11239 - 11249. (Reino Unido): 2017. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/C7DT02184D>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.099
Posición de publicación: 6
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 45
- 315** Basak, T.; Bhattacharyya, A.; Das, M.; Harms, K.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Phosphatase Mimicking Activity of Two Zinc(II) Schiff Base Complexes with Zn₂O₂ Cores: NBO Analysis and MEP Calculation to Estimate Non-Covalent Interactions. 918593 - Chemistryselect. 2, pp. 6286 - 6295. (Alemania): 2017. ISSN 2365-6549
DOI: <https://doi.org/10.1002/slct.201701246>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.505
Posición de publicación: 106
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 171
- 316** Roy, S.; Bhattacharyya, A.; Herrero, S.; González-Prieto, R.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Accidental Orthogonality Induced Weak Magnetic Coupling in a Dinuclear Copper(II) Complex: Exploration of Unconventional C-H $\cdots$ π (SCN) Interactions and Catechol Oxidase Activity. 918593 - Chemistryselect. 2, pp. 6534 - 6543. (Alemania): 2017. ISSN 2365-6549
DOI: <https://doi.org/10.1002/slct.201701016>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.505
Posición de publicación: 106
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 171
- 317** Bhattacharyya, A.; Bauzá, A.; Sproules, S.; Natrajan, L. S.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. A polynuclear and two dinuclear copper(II) Schiff base complexes: Synthesis, characterization, self-assembly, magnetic property and DFT study. 900768 - Polyhedron. 137, pp. 332 - 346. (Reino Unido): 2017. ISSN 0277-5387
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2017.08.010>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.067
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: No

**Posición de publicación:** 18**Num. revistas en cat.:** 45**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Índice de impacto:** 2.067**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 14**Num. revistas en cat.:** 26

- 318** Jana, N. Ch.; Brandão, P.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Panja, A. Influence of ancillary ligands on preferential geometry and biomimetic catalytic activity in manganese(III)-catecholate systems: A combined experimental and theoretical study. 900757 - Journal of Inorganic Biochemistry. 176, pp. 77 - 89. (Estados Unidos de América): 2017. ISSN 0162-0134

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2017.08.008>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY**Índice de impacto:** 3.063**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 136**Num. revistas en cat.:** 293**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Índice de impacto:** 3.063**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 10**Num. revistas en cat.:** 45

- 319** Banerjee, S.; Brandao, P.; Bauza, A.; Frontera, A.; Barcelo-Oliver, M.; Panja A.; Saha, A. Nuclearity versus oxidation state in catalytic efficiency of MnII/III azo Schiff base complexes: Computational study on supramolecular interactions and phenoxazinone synthase like activity. 900672 - New Journal of Chemistry. 41, pp. 11607. (Francia): 2017. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7NJ02280H>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 3.201**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 65**Num. revistas en cat.:** 171

- 320** Roy, S.; Drew, M. G. B.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Suitable Interplay between Various Conventional and Unconventional Non-Covalent Interactions in Forming Self-Assembled Supramolecules of Two Ni(II)/Zn(II) Schiff Base Complexes. 918593 - Chemistryselect. 2, pp. 7880. (Alemania): 2017. ISSN 2365-6549

DOI: <https://doi.org/10.1002/slct.201700853>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 1.505**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 106**Num. revistas en cat.:** 171

- 321** Bhattacharyya, A.; Das, M.; Bauzá, A.; Herrero, S.; González-Prieto, R.; Frontera, A. Chattopadhyay, S. Both end-on and end-to-end azide bridged tetranuclear ferromagnetic nickel(II) Schiff base complex. 900672 - New Journal of Chemistry. 41, pp. 13585. (Francia): 2017. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7NJ00852J>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 3.201**Revista dentro del 25%:** No

**Posición de publicación:** 65**Num. revistas en cat.:** 171

- 322** Mahmoudi, G.; Zareba, J. K.; Gurbanov, A. V.; Bauza, A.; Zubkov, F. I.; Kubicki, M.; Stilinović, V.; Kinzhybalo, V.; Frontera, A. Benzyl dihydrazone versus thiosemicarbazone Schiff bases: supramolecular arrangements of cobalt thiocyanate complexes and the generation of CoN₆ and CoN₄S₂ coordination spheres. 910604 - European Journal of Inorganic Chemistry. 2017, pp. 4763 - 4772. (Desconocido): 2017. ISSN 1434-1948

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic.201700955>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Índice de impacto:** 2.507**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 14**Num. revistas en cat.:** 45

- 323** López-Andarias, J.; Frontera, A.; Matile, S. Anion- π Catalysis on Fullerenes. 900665 - Journal of the American Chemical Society. 139, pp. 13296 - 13299. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2017. ISSN 0002-7863

DOI: <https://doi.org/10.1021/jacs.7b08113>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 14.357**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 8**Num. revistas en cat.:** 171

- 324** Terrón, A.; Tomàs, Ll.; Bauzá, A.; García-Raso, A.; Fiol, J. J.; Molins, E.; Frontera, A. The first X-ray structure of a silver-nucleotide complex: interaction of ion Ag(I) with cytidine-5'-monophosphate. 912697 - Crystengcomm. 19, pp. 5830 - 5834. (Reino Unido): 2017. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7CE01400G>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 7**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 3.304**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 62**Num. revistas en cat.:** 171**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Índice de impacto:** 3.304**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 8**Num. revistas en cat.:** 26

- 325** Mandal, A.; Dasgupta, S.; Ganguly, S.; Bauza, A.; Frontera, A.; Das, D. Cooperative Influence of Pseudohalides and Ligand Backbone of Schiff-bases on Nuclearity and Stereochemistry of Cobalt(III) Complexes: Experimental and Theoretical Investigation. 912705 - Dalton Transactions. 46, pp. 15257. (Reino Unido): 2017. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7DT03040A>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Índice de impacto:** 4.099**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 6**Num. revistas en cat.:** 45

- 326** Roy, S.; Basak, T.; Khan, S.; Drew, M. G. B.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. A Combined Experimental and Theoretical Study on the Formation of a Cyclic Tetrameric Water Cluster and a Similar Type of Cyclic Cluster in Copper(II) Schiff Base Complexes. 918593 - Chemistryselect. 2, pp. 9336 - 9343. (Alemania): 2017. ISSN 2365-6549
DOI: <https://doi.org/10.1002/slct.201701266>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.505
Posición de publicación: 106
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 171
- 327** Ray, S. T.; Butcher, J.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Mitra, S. Theoretical investigation on molecular structure of a new mononuclear copper(II) thiocyanato complex with tridentate Schiff base ligand. 900755 - Journal of Coordination Chemistry. 70, pp. 3715 - 3726. (Reino Unido): 2017. ISSN 0095-8972
DOI: <https://doi.org/10.1080/00958972.2017.1394460>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.703
Posición de publicación: 26
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 45
- 328** Bauza, A.; Frontera, A. Concurrent aerogen bonding and lone pair/anion- π interactions in the stability of organoxenon derivatives: A combined CSD and ab initio study. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 19, pp. 30063. (Reino Unido): 2017. ISSN 1463-9076
DOI: <https://doi.org/10.1039/C7CP06685F>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.906
Posición de publicación: 46
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 147
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.906
Posición de publicación: 9
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 37
- 329** Yogendra, S.; Hennersdorf, F.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Fischer, R.; Weigand, J. J. Donor-acceptor interactions in tri(phosphonio)methanide dications $[(\text{Ph}_3\text{P})_2\text{CP}(\text{X})\text{Ph}_2]^{2+}$ (X = H, Me, CN, NCS, OH, Cl, OTf, F). 912705 - Dalton Transactions. 46, pp. 15503 - 15511. (Reino Unido): 2017. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/C7DT03271D>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.099
Posición de publicación: 6
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 45
- 330** Roy, S.; Drew, M. G. B.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. A Combined Experimental and Theoretical Study to Explore the Importance of σ -Hole Carbon Bonding Interactions in Stabilizing Molecular Assemblies. 918593 - Chemistryselect. 2, pp. 10586 - 10594. (Alemania): 2017. ISSN 2365-6549
DOI: <https://doi.org/10.1002/slct.201702123>

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1.505**Posición de publicación:** 106**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 171

- 331** Thakura, S.; Sarkara, N.; Drew, M. G. B.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Estimating the energy of noncovalent interactions in a dioxovanadium(V) Schiff base complex: Exploration of its phenoxazinone synthase like activity. 900768 - Polyhedron. 142, pp. 83 - 92. (Reino Unido): 2017. ISSN 0277-5387

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2017.11.053>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.067**Posición de publicación:** 18**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 45**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.067**Posición de publicación:** 14**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 26

- 332** Banerjee, S.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Saha, A. Crystallographic characterization and elucidation of unconventional interactions of small molecules. 918334 - Acta Crystallographica a-Foundation And Advances. 73, (Reino Unido): 2017. ISSN 2053-2733

DOI: <https://doi.org/10.1107/S2053273317086168>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 7.93**Posición de publicación:** 22**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 171**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 7.93**Posición de publicación:** 2**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 26

- 333** Bauzá, A.; Terrón, A.; Barceló-Oliver, M.; García-Raso, A.; Frontera, A. On the importance of antiparallel C=O...C F interactions in N1-(3-hydroxypropyl)-5-fluorouracilate Hg(II) complex: A combined X-ray and DFT study. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 452, pp. 244 - 250. (Suiza): 2016. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2015.04.028>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.002**Posición de publicación:** 20**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 46

- 334** Roy, S.; Bauza, A.; Frontera, A.; Schaper, F.; Banik, R.; Purkayastha, A.; Reddy, B. M.; Sridhar, B.; Drew, M. G. B.; Das, S. K.; Das, S. Structural diversity and non-covalent interactions in Cd (II) and Zn (II) complexes derived from 3, 5-dinitrobenzoic acid and pyridine: Experimental and theoretical aspects. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 440, pp. 38 - 47. (Suiza): 2016. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2015.10.025>

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.002**Posición de publicación:** 20**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 46

- 335** Bauza, A.; T. J. Mooibroek, Frontera, A. 1,1,2,2-tetracyanocyclopropane (TCCP) as supramolecular synthon. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 18, pp. 1693 - 1698. (Reino Unido): 2016. ISSN 1463-9076
DOI: <https://doi.org/10.1039/C5CP06350G>

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.123**Posición de publicación:** 38**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 146**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.123**Posición de publicación:** 6**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 36

- 336** Abedi, M.; Zafer Yeşilel, O.; Mahmoudic, G.; Bauzá, A.; Lofland, S. E.; Yerli, Y.; Kaminsky, W.; Garczarek, P.; Zaręba, J. K.; Ienco, A.; Frontera, A.; Servati Gargari, M. Tetranuclear manganese(II) complexes of hydrazone and carbohydrazone ligands: Synthesis, crystal structures, magnetic properties, Hirshfeld surface analysis and DFT calculations. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 443, pp. 101 - 109. (Suiza): 2016. ISSN 0020-1693
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2015.12.012>

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.002**Posición de publicación:** 20**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 46

- 337** Mahmoudi, G.; Castineiras, A.; Bauza, A.; Garczarek, P.; Rheingold, A. L.; Kinzhybalov, V.; Frontera, A. Synthesis, X-ray characterization, DFT calculations and Hirshfeld surface analysis of M(n+) ions (n = 2,3; M = Ni, Cd, Mn, Co and Cu): The role of secondary bonding and steric effects in complexes based on thiosemicarbazone. 912697 - Crystengcomm. 18, pp. 1009 - 1023. (Reino Unido): 2016. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/C5CE02371H>

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.474**Posición de publicación:** 49**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 166**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.474**Posición de publicación:** 5**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 26

- 338** Mahapatra, T. S.; Bauzá, A.; Dutta, D.; Mishra, S.; Frontera, A.; Ray, D. Carboxylate Coordination Assisted Aggregation for Quasi-Tetrahedral and Partial-Dicubane [Cu₄] Coordination Clusters. 918593 - Chemistryselect. 1, pp. 64 - 75. (Alemania): 2016. ISSN 2365-6549
DOI: <https://doi.org/10.1002/slct.201600006>

**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:****Índice de impacto:****Posición de publicación:** 165**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 166

- 339** Mahmoudi, G.; Bauza, A.; Frontera, A. Concurrent Agostic and Tetrel bonding interactions in Lead(II) complexes with a isonicotinohydrazide based ligand and several anions. 912705 - Dalton Transactions. 45, pp. 4965 - 4969. (Reino Unido): 2016. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C6DT00131A>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.029**Posición de publicación:** 7**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 46

- 340** Hazari, A.; Das, L.K.; Bauza, A.; Frontera, A.; Ghosh, A. Exploring the coordinative adaptation and molecular shapes of the trinuclear Cu_3L_2M ($M = Zn/Cd$) complexes derived from salen type Schiff bases: Structural and theoretical studies. 912705 - Dalton Transactions. 45, pp. 5730 - 5740. (Reino Unido): 2016. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C5DT04941E>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.029**Posición de publicación:** 7**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 46

- 341** Ghosh, K.; Roy, S.; Ghosh, A.; Banerjee, A.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Three mononuclear octahedral cobalt(III) complexes with salicylaldehyde Schiff bases: Synthesis, characterization, phenoxazinone synthase mimicking activity and DFT study on supramolecular interactions. 900768 - Polyhedron. 112, pp. 6 - 17. (Reino Unido): 2016. ISSN 0277-5387

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2016.02.035>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1.926**Posición de publicación:** 22**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 46**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1.926**Posición de publicación:** 13**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 26

- 342** Subrata Jana, S.; Chandra Santra, R.; Frontera, A.; Drew, M. G. B.; Ortega-Castro, J.; Fernández, D.; Das, S.; Chattopadhyay, S. Copper(II) pseudohalide complexes with isomeric N_2O donor Schiff base ligands: Synthesis, characterization and molecular dynamics simulations of interactions with DNA. 918593 - Chemistryselect. 1 - 3, pp. 448 - 455. (Alemania): 2016. ISSN 2365-6549

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 8**Fuente de impacto:****Índice de impacto:****Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No

**Posición de publicación:** 165**Num. revistas en cat.:** 166

- 343** Bauza, A.; Mooibroek, T. J.; Frontera, A. σ -Hole opposite to a lone pair: unconventional pnictogen bonding interactions between ZF₃ (Z = N, P, As and Sb) compounds and several donors. 910825 - Chemphyschem. 17, pp. 1608. (Alemania): 2016. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.201600073>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Índice de impacto:** 3.075**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 54**Num. revistas en cat.:** 146**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Índice de impacto:** 3.075**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 8**Num. revistas en cat.:** 36

- 344** Bauza, A.; Frontera, A. RCH₃...O Interactions in Biological Systems: Are They Trifurcated H-Bonds or Noncovalent Carbon Bonds?. 918343 - Crystals. 6, pp. 26. (Suiza): 2016. ISSN 2073-4352

DOI: <https://doi.org/10.3390/cryst6030026>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Índice de impacto:** 1,566**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 18**Num. revistas en cat.:** 26**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 1,566**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 165**Num. revistas en cat.:** 275

- 345** Ghosh, K.; Banerjee, A.; Roy, S.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. A combined experimental and theoretical study on supramolecular assemblies in octahedral cobalt(III) salicylaldehyde complexes having pendant side arms. 900768 - Polyhedron. 112, pp. 86 - 95. (Reino Unido): 2016. ISSN 0277-5387

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2016.03.008>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Índice de impacto:** 1.926**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 22**Num. revistas en cat.:** 46**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Índice de impacto:** 1.926**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 13**Num. revistas en cat.:** 26

- 346** Barman, N.; Banerjee, S.; Brandão, P.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Saha, A. Anion dependent structural diversity of cadmium(II) complexes: Synthesis, crystal structures, luminescence properties and unusual C-H/ σ supramolecular interactions involving σ -aromatic M₂X₂ cores. 900755 - Journal of Coordination Chemistry. 69, pp. 1188 - 1205. (Reino Unido): 2016. ISSN 0095-8972

DOI: <https://doi.org/10.1080/00958972.2016.1173205>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista



Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.795

Posición de publicación: 24

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 46

- 347** Bhowmik, P.; Das, L. K.; Bauzá, A.; Chattopadhyay, S.; Frontera, A.; Ghosh, A. Anion dependent supramolecular architectures in Cu(II) complexes containing N2O-donor Schiff-base and 4,4'-bipyridine ligands: Structural analyses and theoretical studies. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 448, pp. 26 - 33. (Suiza): 2016. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2016.03.049>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.002

Posición de publicación: 20

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 46

- 348** Banerjee, S.; Bauza, A.; Frontera, A.; Saha, A. Exploration of unconventional π -hole and C-H...H-C types of supramolecular interactions in a trinuclear Cd(II) and a heteronuclear Cd(II)-Ni(II) complex and experimental evidence for preferential site selection of the ligand by 3d and 4d metal ions. 917082 - Rsc Advances. 6, pp. 39376 - 39386. (Reino Unido): 2016. ISSN 2046-2069

DOI: <https://doi.org/10.1039/C6RA04428J>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.108

Posición de publicación: 59

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 166

- 349** Majumder, I.; Chakraborty, P.; Adhikary, J.; Kara, H.; Zangrando, E.; Bauza, A.; Frontera, A.; Das, D. Auxiliary Part of Ligand Mediated Unique Coordination Chemistry of Copper (II). 918593 - Chemistryselect. 1 - 3, pp. 615 - 625. (Alemania): 2016. ISSN 2365-6549

DOI: <https://doi.org/10.1002/slct.201500030>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto:

Índice de impacto:

Posición de publicación: 165

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 166

- 350** Bhattacharya, S.; Roy, S.; Harms, K.; Bauzá, A.; Chattopadhyay, S.; Frontera, A.; Ghosh, A. Importance of chelate-chelate stacking interactions in crystal structures of square pyramidal copper(II) complexes with two distinct chelating bidentate. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 442, pp. 16 - 23. (Suiza): 2016. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2015.11.002>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.002

Posición de publicación: 20

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 46

- 351** Afkhami, F. A.; Khandar, A.; Mahmoudi, G.; Maniukiewicz, W.; Lipkowski, J.; White, J. M.; Waterman, R.; Garcia-Granda, S.; Zangrando, E.; Bauza, A.; Frontera, A. Synthesis, X-ray characterization, DFT calculations and Hirshfeld surface analysis of Zn(II) and Cd(II) complexes based on isonicotinoylhydrazonone ligand. 912697 - Crystengcomm. 18, pp. 4587 - 4596. (Reino Unido): 2016. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/C6CE00877A>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Revista dentro del 25%: No
Índice de impacto: 3.474
Num. revistas en cat.: 166
Posición de publicación: 49
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Revista dentro del 25%: Si
Índice de impacto: 3.474
Num. revistas en cat.: 26
Posición de publicación: 5
- 352** Bazargan, M.; Mirzaei, M.; Eshtiagh-Hosseini, H.; Mague, J. T.; Bauzá, A.; Frontera, A. Synthesis, X-ray Characterization and DFT study of a novel Fe(III)-Pyridine-2,6-Dicarboxylic Acid N-oxide Complex with Unusual Coordination Mode. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 449, pp. 44 - 51. (Suiza): 2016. ISSN 0020-1693
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2016.04.044>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Revista dentro del 25%: No
Índice de impacto: 2.002
Num. revistas en cat.: 46
Posición de publicación: 20
- 353** Roy, S.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. A combined experimental and computational study of supramolecular assemblies in two photoluminescent cadmium(II) complexes with halosalicylaldimine Schiff bases. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 450, pp. 321 - 329. (Suiza): 2016. ISSN 0020-1693
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2016.05.030>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Revista dentro del 25%: No
Índice de impacto: 2.002
Num. revistas en cat.: 46
Posición de publicación: 20
- 354** Mahmoudi, G.; Bauza, A.; Frontera, A.; Garczarek, P.; Stilinovic, V.; Kirillov, A. M.; Kennedy, A. R.; Ruiz-Perez, C. Metal-organic and Supramolecular Lead(II) Networks Assembled from Isomeric Nicotinoylhydrazonone Blocks: The Effects of Ligand Geometry and Counter-ion on Topology and Supramolecular Assembly. 912697 - Crystengcomm. 18, pp. 5375 - 5385. (Reino Unido): 2016. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/C6CE00900J>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Revista dentro del 25%: No
Índice de impacto: 3.474
Num. revistas en cat.: 166
Posición de publicación: 49
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Revista dentro del 25%: Si
Índice de impacto: 3.474
Num. revistas en cat.: 26
Posición de publicación: 5

- 355** Jana, S.; Bhowmik, S.; Harms, K.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Theoretical study on the degree of delocalization of unpaired spin in two mixed valence copper(II/I) complexes with isomeric chelating diamines and iodide. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 451, pp. 16 - 22. (Suiza): 2016. ISSN 0020-1693
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2016.05.050>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.002
Posición de publicación: 20
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 46
- 356** Datta, A.; Das, K.; Mane, S.; Salah El Fallah, M.; Garribba, E.; Bauza, A.; Frontera, A.; Mendiratta, S.; Hung, C.-H.; Sinha, C. A rare doubly nitrato and phenoxido bridged trimetallic CuII complex: EPR, antiferromagnetic coupling and theoretical rationalization. 917082 - Rsc Advances. 6, pp. 54856 - 54865. (Reino Unido): 2016. ISSN 2046-2069
DOI: <https://doi.org/10.1039/C6RA10674A>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.108
Posición de publicación: 59
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 166
- 357** Mahmoudi, G.; Bauza, A.; Amini, M.; Molins, E.; Mangué, J. T.; Frontera, A. On the importance of tetrel bonding interactions in Lead(II) complexes with (iso)nicotinohydrazide based ligands and several anions. 912705 - Dalton Transactions. 45, pp. 10708 - 10716. (Reino Unido): 2016. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/c6dt01947a>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.029
Posición de publicación: 7
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 46
- 358** Oliver, M.; Bauza, A.; Frontera, A.; Miró, M. Fluorescent Lipid Nanoparticles as Biomembrane Models for Exploring Emerging Contaminant Bioavailability Supported by Density Functional Theory Calculations. 901472 - Environmental Science & Technology. 50 - 13, pp. 7135 - 7143. (Estados Unidos de América): 2016. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0039914016303125>>. ISSN 0013-936X
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.est.6b00772>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 6.198
Posición de publicación: 12
Tipo de soporte: Revista
Categoría: ENVIRONMENTAL SCIENCES
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 229
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 6.198
Posición de publicación: 4
Categoría: ENGINEERING, ENVIRONMENTAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 49
- 359** Mahjoobizadeh, M.; Mirzaei, M.; Bauza, A.; Lippolis, V.; Aragoni, M. C.; Shamsipur, M.; Ghanbari, M.; Frontera, A. Coordination Behavior of Chelidamic Acid With V(V), Ni(II), Fe(III) and Ca(II): Syntheses, X-ray Characterization and DFT Studies. 918593 - Chemistryselect. 1 - 8, pp. 1556 - 1566. (Alemania): 2016. ISSN 2365-6549
DOI: <https://doi.org/10.1002/slct.201600150>

**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:****Índice de impacto:****Posición de publicación:** 165**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 166

- 360** Khan, S.; Jana, S.; Drew, M. G. B.; Bauza, A.; Frontera A.; Chattopadhyay, S. A novel method for copper(II) mediated region-selective bromination of aromatic ring under mild condition. 917082 - Rsc Advances. 6, pp. 61214 - 61220. (Reino Unido): 2016. ISSN 2046-2069

DOI: <https://doi.org/10.1039/C6RA13215D>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.108**Posición de publicación:** 59**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 166

- 361** Banik, R.; Roy, S.; Kirillov, A. M.; Bauza, A.; Frontera, A.; Rodriguez-Dieguez, A.; Salas, J. M.; Maniukiewicz, W.; Das, S. K.; Das, S. Two mixed-ligand cadmium(II) compounds bearing 5-nitrosopyrimidine and N-donor aromatic blocks: Self-assembly generation, structural and topological features, DFT studies, and Hirshfeld surface analysis. 912697 - Crystengcomm. 18, pp. 5647 - 5657. (Reino Unido): 2016. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C6CE00989A>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.474**Posición de publicación:** 49**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 166**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.474**Posición de publicación:** 5**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 26

- 362** Pal, P.; Konar, S.; Lama, P.; Das, K.; Bauza, A.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. On the Importance of Noncovalent Carbon Bonding Interactions in the Stabilization of a 1D Co(II) Polymeric Chain as Precursor of a Novel 2D Coordination Polymer. 909613 - Journal of Physical Chemistry B. 120, pp. 6803 - 6811. (Estados Unidos de América): 2016. ISSN 1520-6106

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcb.6b04046>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 9**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.177**Posición de publicación:** 49**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 146

- 363** Mahmoudi, G.; Stilinovic, V.; Bauza, A.; Frontera, A.; Bartyzel, A.; Ruiz-Perez, C.; Kirillov, A. M. Inorganic-Organic Hybrid Materials Based on PbBr₂ and Pyridine-Hydrazone Blocks - Structural and Theoretical Study. 917082 - Rsc Advances. 6, pp. 60385 - 60393. (Reino Unido): 2016. ISSN 2046-2069

DOI: <https://doi.org/10.1039/C6RA13462A>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY



Índice de impacto: 3.108
Posición de publicación: 59

Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 166

- 364** Schwedtmann, K.; Schoemaker, R.; Hennersdorf, F.; Bauzá, A. Frontera, A.; Weiss, R.; Weigand, J. J. Cationic 5-phosphonio-substituted N-heterocyclic carbenes. 912705 - Dalton Transactions. 45, pp. 11384 - 11396. (Reino Unido): 2016. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C6DT01871H>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.029

Posición de publicación: 7

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 46

- 365** Balakrishna, B; Bauza, A.; Frontera, A.; Vidal-Ferran, A. Asymmetric Hydrogenation of Seven-Membered C=N-containing Heterocycles and Rationalization of the Enantioselectivity. 908895 - Chemistry-A European Journal. 22, pp. 10607 - 10613. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2016. ISSN 0947-6539

DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201601464>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.317

Posición de publicación: 29

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 166

- 366** Prohens, R.; Portell, A.; Font-Bardia, A.; Bauza, A.; Frontera, A. Experimental and theoretical study of weak intermolecular interactions in crystalline tertiary squaramides. 912697 - Crystengcomm. 18, pp. 6437 - 6443. (Reino Unido): 2016. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C6CE01299J>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.474

Posición de publicación: 49

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 166

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.474

Posición de publicación: 5

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 26

- 367** Bauza, A.; Frontera, A. Electrostatically enhanced F...F interactions through hydrogen bonding, halogen bonding and metal coordination: An ab initio study. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 18, pp. 20381 - 20388. (Reino Unido): 2016. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/C6CP03862J>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.123

Posición de publicación: 38

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 146

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.123

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 6**Num. revistas en cat.:** 36

- 368** Bauza, A.; Frontera, A. On the versatility of BH₂X (X = F, Cl, Br and I) compounds as halogen, hydrogen and triel bond donors: An ab initio study. 910825 - Chemphyschem. 17, pp. 3181 - 3186. (Alemania): 2016. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.201600683>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Índice de impacto:** 3.075**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 54**Num. revistas en cat.:** 146**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Índice de impacto:** 3.075**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 8**Num. revistas en cat.:** 36

- 369** Roy, S.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. A combined experimental and theoretical study on the synthesis and characterization of two new dinuclear cadmium(II) Schiff base complexes with selenocyanate-κ-Se. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 450, pp. 321 - 329. (Suiza): 2016. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2016.07.017>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Índice de impacto:** 2.002**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 20**Num. revistas en cat.:** 46

- 370** Roy, S.; Oyarzabal, I.; Vallejo, J.; Cano, J.; Colacio, E.; Bauza, A.; Frontera, A.; Kirillov, A. M.; Drew, M. G. B.; Das, S. Two Polymorphic Forms of a Six-Coordinate Mononuclear Cobalt(II) Complex with Easy-Plane Anisotropy: Structural Features, Theoretical Calculations, and Field-Induced Slow Relaxation of the Magnetization. 900752 - Inorganic Chemistry. 55, pp. 8502 - 8513. (Estados Unidos de América): 2016. ISSN 0020-1669

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.6b01087>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Índice de impacto:** 4.857**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 4**Num. revistas en cat.:** 46

- 371** Panja, A.; Jana, N. Ch.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Mathonière, C. Solvent-Triggered Cis/Trans Isomerism in Cobalt Dioxolene Chemistry: Distinguishing Effects of Packing on Valence Tautomerism. 900752 - Inorganic Chemistry. 55, pp. 8331 - 8340. (Estados Unidos de América): 2016. ISSN 0020-1669

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.6b00402>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Índice de impacto:** 4.857**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 4**Num. revistas en cat.:** 46

- 372** Adak, P.; Ghosh, B.; Bauza, A.; Frontera, A.; Blake, A. J.; Corbella, M.; Mukhopadhyay, C. D.; Chattopadhyay, S. K. Catecholase activity, DNA binding and Cytotoxicity studies of a Cu(II) complex of a pyridoxal Schiff base: Synthesis, X-ray crystal structure, spectroscopic, electrochemical and theoretical studies. 917082 - Rsc Advances. 6, pp. 86851. (Reino Unido): 2016. ISSN 2046-2069

DOI: <https://doi.org/10.1039/C6RA14059A>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 3.108

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 59

Num. revistas en cat.: 166

- 373** Bhattacharyy, A.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Modulation in $\pi \cdots \pi$, cation $\cdots \pi$ and C-H $\cdots$ H-C interactions varying the counter anions in square planar nickel(II) Schiff base complex: A combined experimental and theoretical study. 900768 - Polyhedron. 119, pp. 459. (Reino Unido): 2016. ISSN 0277-5387

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2016.08.047>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 1.926

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 22

Num. revistas en cat.: 46

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Índice de impacto: 1.926

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 13

Num. revistas en cat.: 26

- 374** Banik, R.; Roy, S.; Dlháň, L.; Titis, J.; Boca, R.; Kirillov, A. M.; Martin, A. D.; Bauza, A.; Frontera, A.; Rodriguez-Dieguez, A.; Salas, J. M.; Das, S. Self-assembly synthesis, structure, topology, and magnetic properties of a mononuclear Fe(III)-violurate derivative: A combined experimental and theoretical study. 912705 - Dalton Transactions. 45, pp. 16166. (Reino Unido): 2016. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C6DT03139K>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 4.029

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 7

Num. revistas en cat.: 46

- 375** Purkait, S.; Chakraborty, P.; Bauza, A.; Frontera, A.; Masera, C.; Das, D. Halide Ion Mediated Aldehyde-Amine Condensation Leading to Schiff-base and Cyclized Non-Schiff-base Ligand Complexes of CdII: A Combined Experimental and Theoretical Investigation. 918593 - Chemistryselect. 1 - 15, pp. 4539. (Alemania): 2016. ISSN 2365-6549

DOI: <https://doi.org/10.1002/slct.201600967>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto:

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto:

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 165

Num. revistas en cat.: 166

- 376** Purkayastha, A.; Debnath, D.; Roy, S.; Bauzá, A.; Choudhury, R.; Frontera, A.; Misra, T. K. Synthesis and investigation of solid and solution state structures of nickel(II) complexes with 1,3-dimethyl-5-(arylo)-6-aminouracil. 910604 - European Journal of Inorganic Chemistry. 2016, pp. 5585. (Desconocido): 2016. ISSN 1434-1948
DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic.201601021>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 7
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Índice de impacto: 2.444 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 13 **Num. revistas en cat.:** 46
- 377** Halder, S.; Dey, A.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Ray, P. P.; Roy, P. Irradiation Specified Conformational Change in a Small Organic Compound and Its Effect on Electrical Properties. 914198 - Journal Of Physical Chemistry C. 120 - 44, pp. 25557 - 25563. (Estados Unidos de América): 2016. ISSN 1932-7447
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b10081>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL
Índice de impacto: 4.536 **Revista dentro del 25%:** Si
Posición de publicación: 31 **Num. revistas en cat.:** 146
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 4.536 **Revista dentro del 25%:** Si
Posición de publicación: 43 **Num. revistas en cat.:** 275
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY
Índice de impacto: 4.536 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 25 **Num. revistas en cat.:** 87
- 378** Mahmoudi, G.; Bauzá, A.; Gurbanov, A. V.; Zubkov, F. I.; Maniukiewicz, W.; Rodríguez-Diéguez, A.; López-Torres, E.; Frontera, A. The role of unconventional stacking interactions in the supramolecular assemblies of Hg(II) coordination compounds. 912697 - Crystengcomm. 18, pp. 9056 - 9066. (Reino Unido): 2016. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/C6CE02073A>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 3.474 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 49 **Num. revistas en cat.:** 166
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY
Índice de impacto: 3.474 **Revista dentro del 25%:** Si
Posición de publicación: 5 **Num. revistas en cat.:** 26
- 379** Mirzaei, M.; Eshtiagh-Hosseini, H.; Karrabi, Z.; Notash, B.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Habibi, M.; Ardalani, M.; Shamsipur, M. Synthesis, structure, solution and DFT studies of a pyrazine-bridged binuclear Cu(II) complex: On the importance of noncovalent interactions in the formation of crystalline network. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1079, pp. 78 - 86. (Holanda): 2015. ISSN 0022-2860
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2014.09.019>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147909>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.78

Posición de publicación: 94

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 144

- 380** Mirzaei, M.; Eshtiagh-Hosseini, H.; Karrabi, Z.; Notash, B.; Bauzá, A.; Frontera, A. Synthesis, structure and DFT studies of a chelidamic acid based Cu coordination polymer: On the importance of pi-pi interactions and hexameric water cluster. 900839 - Journal of Molecular Structure. 1080, pp. 30 - 36. (Holanda): 2015. ISSN 0022-2860

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2014.09.053>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147504>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.78

Posición de publicación: 94

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 144

- 381** Saha, S.; Sasmal, A.; Choudhury, C.R.; Pilet, G.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Chakraborty, S.; Mitra, S. Synthesis, crystal structure, antimicrobial screening and density functional theory calculation of Nickel (II), Cobalt (II) and Zinc (II) mononuclear Schiff base complexes. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 425, pp. 211 - 220. (Suiza): 2015. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2014.10.007>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147812>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.918

Posición de publicación: 22

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 46

- 382** Jana, S.; Harms, K.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Synthesis, structures and DFT study of CuBr based coordination polymers via in situ reduction of copper(II). 911335 - Crystal Growth & Design. 15, pp. 257 - 267. (Estados Unidos de América): 2015. ISSN 1528-7483

DOI: <https://doi.org/10.1021/cg5013236>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147927>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.425

Posición de publicación: 32

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 163

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.425

Posición de publicación: 3

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 26

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.425

Posición de publicación: 41

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 271

- 383** Mirzaei, M.; Hassanpoor, A.; Eshtiagh-Hosseini, H.; Bauzá, A.; Mague, J.T.; Frontera, A. A new solvated complex of the uranyl ion (UO₂²⁺) with 8-hydroxyquinoline. 900754 - *Inorganica Chimica Acta*. 426, pp. 136 - 141. (Suiza): 2015. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2014.10.032>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147969>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.918

Posición de publicación: 22

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 46

- 384** Bauzá, A.; Escudero, D.; Frontera, A.; Streubel, R. Electronic Structure of N₂P₂ Four-Membered Rings and the Effect of Their Ligand Coordination to M(CO)₅ (Cr, Mo, and W). 900802 - *Organometallics*. 34, pp. 355 - 360. (Estados Unidos de América): 2015. ISSN 0276-7333

DOI: <https://doi.org/10.1021/om501142k>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147965>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.186

Posición de publicación: 9

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 46

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.186

Posición de publicación: 12

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 59

- 385** Hazari, A.; Das, L.K.; Kadam, R.M.; Bauza, A.; Frontera, A.; Ghosh, A. Unprecedented structural variations in trinuclear mixed valence Co(II/III) complexes derived from a Schiff base and its reduced form: Theoretical studies, pnictogen bonding interactions and catecholase-like activities. 912705 - *Dalton Transactions*. 44, pp. 3862 - 3876. (Reino Unido): 2015. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C4DT03446E>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147813>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.177

Posición de publicación: 10

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 46

- 386** Banik, R.; Roy, S.; Bauza, A.; Frontera, A.; Das, S. Cadmium(II) complexes containing N,N'-dimethylvioluric acid as ligand or counteranion: Synthesis, characterization, crystal structures and DFT study. 917082 - *Rsc Advances*. 5, pp. 10826 - 10836. (Reino Unido): 2015. ISSN 2046-2069

DOI: <https://doi.org/10.1039/C4RA10251G>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147967>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.289

Posición de publicación: 49

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 163

- 387** Murcia, C.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Streubel, R. Surprising behaviour of M CO(lone pair)···pi(arene) interactions in the solid state of fluorinated oxaphosphirane complexes. 912697 - Crystengcomm. 17, pp. 1769 - 1772. (Reino Unido): 2015. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C5CE00104H>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147619>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.849

Posición de publicación: 38

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.849

Posición de publicación: 5

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 163

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 26

- 388** Mirzaei, M.; Eshtiagh-Hosseini, H.; Bolouri, Z.; Rahmati, Z.; Esmaeilzadeh, A.; Hassanpoor, A.; Bauza, A.; Ballester, P.; Barcelo-Oliver, M.; Mague, J. T.; Notash, B.; Frontera, A. Rationalization of noncovalent interactions within six new MII/8-aminoquinoline supramolecular complexes (MII = Mn, Cu, and Cd): A combined experimental and theoretical DFT study. 911335 - Crystal Growth & Design. 15, pp. 1351 - 1361. (Estados Unidos de América): 2015. ISSN 1528-7483

DOI: <https://doi.org/10.1021/cg501752e>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147620>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 12

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.425

Posición de publicación: 32

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.425

Posición de publicación: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.425

Posición de publicación: 41

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 163

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 26

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 271

- 389** Pait, M.; Shatruck, M.; Lengyel, J.; Gómez-Coca, S.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Bertolasi, V.; Ray, D. Two Types of Nitrito Support for μ_4 -Oxido-Bridged [Cu₄] Complexes: Synthesis, Crystal Structures, Magnetic Properties and DFT Analysis. 912705 - Dalton Transactions. 44, pp. 6107 - 6117. (Reino Unido): 2015. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C4DT03224A>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147895>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.177

Posición de publicación: 10

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 46

- 390** Sadhukhan, D.; Maiti, M.; Pilet, G.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Mitra, S. Hydrogen Bond, pi pi, and CH pi Interactions Governing the Supramolecular Assembly of Some Hydrazone Ligands and Their Mn(II) Complexes Structural and Theoretical Interpretation. 910604 - European Journal of Inorganic Chemistry. 2015, pp. 1958 - 1972. (Desconocido): 2015. ISSN 1434-1948
DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic.201500030>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147579>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.686
Posición de publicación: 12
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 46
- 391** Fernández-Pérez, H.; Mon, I.; Frontera, A.; Vidal-Ferran, A. Enantiopure bisphosphine ligands with appended crown ether groups as regulation sites for Rh-mediated hydrogenations. 900806 - Tetrahedron. (Reino Unido): 2015. ISSN 0040-4020
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.tet.2015.02.073>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147896>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.645
Posición de publicación: 22
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 59
- 392** Mahmoudi, G.; Stilinovic, V.; Servati-Gargari, M.; Bauza, A.; Zaragoza, G.; Kaminsky, W.; Lynch, V.; Choquesillo-Lazarte, D.; Kandasamy, S.; Khandar, A.; Frontera, A. From Monomers to Polymers: Steric and Supramolecular Effects on Dimensionality of Coordination Architectures in Heteroleptic Mercury(II) Halogenide Tetradentate Schiff Base Complexes. 912697 - Crystengcomm. 17, pp. 3493 - 3502. (Reino Unido): 2015. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/C5CE00382B>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147897>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.849
Posición de publicación: 38
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 163
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26
- 393** Mirzaei, M.; Eshtiagh-Hosseini, H.; Alipour, M.; Bauza, A.; Mague, J. T.; Korabik, M.; Frontera, A. Hydrothermal synthesis, X ray structure and DFT and magnetic studies of a novel (H₂SiW₁₂O₄₀)₂ based one dimensional linear coordination polymer via in situ transformation of pyridine 2,3 dicarboxylic acid into nicotinic and 2 hydroxynicotinic acids. 912705 - Dalton Transactions. 44, pp. 8824 - 8832. (Reino Unido): 2015. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/C4DT03950E>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147970>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.177
Posición de publicación: 10
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 46

- 394** Bauzá, A.; Frontera, A.; Mooibroek, T. J.; Reedijk, J. The N-atom in $[N(PR_3)_2]^+$ cations ($R = Ph, Me$) can act as electron donor for (pseudo) anti-electrostatic interactions. 912697 - Crystengcomm. 17, pp. 3768 - 3771. (Reino Unido): 2015. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/C5CE00352K>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147553>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.849
Posición de publicación: 38
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.849
Posición de publicación: 5
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 163
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26
- 395** Roy, S.; Bauza, A.; Frontera, A.; Banik, R.; Purkayastha, A.; Drew, M.G.B.; Reddy, B.M.; Sridhar, B.; Das, S.K.; Das, S. Experimental observation and theoretical investigation on a novel Cd(II) complex with π -hole interaction involving nitro groups. 912697 - Crystengcomm. 17, pp. 3912 - 3916. (Reino Unido): 2015. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/C5CE00453E>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147608>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.849
Posición de publicación: 38
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.849
Posición de publicación: 5
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 163
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26
- 396** Pait, M.; Bauza, A.; Frontera, A.; Colacio, E.; Ray, D. A New Family of Ni_4 and Ni_6 Aggregates from Self-Assembly of $[Ni_2]$ Building Units: Role of Carboxylate and Carbonate Bridges. 900752 - Inorganic Chemistry. 54, pp. 4709 - 4723. (Estados Unidos de América): 2015. ISSN 0020-1669
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.5b00039>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147609>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.82
Posición de publicación: 4
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 46
- 397** 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. (Suiza): 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>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Tipo de soporte: Revista

- 398** Bauzá, A.; Frontera, A. Aerogen Bonding Interaction: A New Supramolecular Force?. 900624 - Angewandte Chemie-International Edition. 54, pp. 7340 - 7343. (Alemania): 2015. ISSN 1433-7851
DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.201502571>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147499>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 11.709
Posición de publicación: 11
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 163
- 399** Pal, P.; Konar, S.; Salah-El Fallah, M.; Das, K.; Bauza, A.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Synthesis, crystal structures, magnetic properties and DFT calculations of nitrate and oxalate complexes with 3,5 dimethyl-1-(2'-pyridyl)-pyrazole-Cu(II). 917082 - Rsc Advances. 5, pp. 45082 - 45091. (Reino Unido): 2015. ISSN 2046-2069
DOI: <https://doi.org/10.1039/C5RA04241K>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152237>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 7
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.289
Posición de publicación: 49
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 163
- 400** Mirzaei, M.; Nikpour, M.; Bauzá, A.; Frontera, A. On the Importance of C H/pi and C H...H C Interactions in the Solid State Structure of 15-Lipoxygenase Inhibitors Based on Eugenol Derivatives. 910825 - Chemphyschem. 16, pp. 2260 - 2266. (Alemania): 2015. ISSN 1439-4235
DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.201500287>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147918>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.138
Posición de publicación: 50
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 144
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.138
Posición de publicación: 8
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 35
- 401** Bhaumik, P. K.; Bauza, A.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Syntheses, crystal structures and density functional theoretical investigations of copper(II) complexes bearing tridentate Schiff base ligands derived from 8-aminoquinoline. 912697 - Crystengcomm. 17, pp. 5664 - 5671. (Reino Unido): 2015. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/C5CE00809C>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147554>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.849
Posición de publicación: 38
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 163



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.849
Posición de publicación: 5

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26

- 402** A. Frontera; A. Bauzá. Unveiling NO₂...C=C π -hole interactions: A combined computational and crystallographic study. 903311 - Chemical Physics Letters. 633, pp. 282 - 286. (Holanda): 2015. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2015.06.005>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147568>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.86

Posición de publicación: 88

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 144

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Índice de impacto: 1.86

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 19

Num. revistas en cat.: 35

- 403** 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. (Reino Unido): 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>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 9.144

Posición de publicación: 14

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 163

- 404** Escudero-Adán, E.C.; Bauza, A.; Frontera, A.; Ballester, P. The Nature of Non-Covalent Carbon Bonding Interaction Derived from Experimental Charge-Density Analysis. 910825 - Chemphyschem. (Alemania): 2015. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.201500437>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147682>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.138

Posición de publicación: 50

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 144

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Índice de impacto: 3.138

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 8

Num. revistas en cat.: 35

- 405** Vidal-Ferran, A.; Mon, I.; Bauza, A.; Frontera, A.; Rovira, L. Supramolecularly Regulated Ligands for Asymmetric Hydroformylations and Hydrogenations. 908895 - Chemistry-A European Journal. 21, pp. 11417 - 11426. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2015. ISSN 0947-6539
DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201501441>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147732>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.771
Posición de publicación: 24
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 163
- 406** Cañellas, S.; Bauza, A.; Lancho, A.; Garcia-Raso, A.; Fiol, J.J.; Molins, M.; Ballester, P.; Frontera, A. Synthesis, X-ray Characterization and DFT Studies of N-benzimidazolyl-pyrimidine M(II) complexes (M = Cu, Co and Ni): the prominent role of pi-hole and anion-pi interactions. 912697 - Crystengcomm. 17 - 31, pp. 5997. (Reino Unido): 2015. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/C5CE01009H>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152238>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.849
Posición de publicación: 38
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 163
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.849
Posición de publicación: 5
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26
- 407** Banik, R.; Roy, S.; Bauza, A.; Frontera, A.; Rodríguez-Diéguez, A.; Salas, J.M.; Kirillov, A.M.; Chowdhury, S.; Das, S.Kr.; Das, S. Supramolecular interactions through lone pair(lp)- π and hydrogen bonding in cobalt(III) and manganese(II) derivatives of N,N'-dimethylvioluric acid: A combined experimental and theoretical study. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 435, pp. 178 - 186. (Suiza): 2015. ISSN 0020-1693
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2015.06.018>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147569>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.918
Posición de publicación: 22
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 46
- 408** Roy, S.; Dey, A.; Ray, P.P.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Application of a novel 2D cadmium(II)-MOF in the formation of a photo-switch with substantial on off ratio. 909184 - Chemical Communications. pp. 12974 - 12976. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2015. Disponible en Internet en: <<http://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2015/cc/c5cc04323a?page=search>>. ISSN 1359-7345
DOI: <https://doi.org/10.1039/C5CC04323A>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147501>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 6.567
Posición de publicación: 21

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 163

- 409** Sanna, Elena; Escudero-Adán, Eduardo Carmelo; Bauzá Riera, Antonio; Ballester Balaguer, Pablo José; Frontera Beccaria, Antonio; Rotger Pons, María del Carmen; Costa Torres, Antonio. A crystalline sponge based on dispersive forces suitable for X-ray structure determination of included molecular guests. 915573 - Chemical Science. 6, pp. 5466 - 5472. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/C5SC01838B>>. ISSN 2041-6520

DOI: <https://doi.org/10.1039/C5SC01838B>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/1763>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 9.144

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 14

Num. revistas en cat.: 163

- 410** Eftekhari, M.; Mirzaei, M.; Hassanpoor, A.; Khosravi, I.; Bauza, A.; Mague, J. T.; Frontera, A. The first mixed-ligand coordination compound involving 8-aminoquinoline and pyridine-2,6-dicarboxylic ligands: Synthesis, X-ray crystal structure and DFT studies. 900755 - Journal of Coordination Chemistry. 68, pp. 3599 - 3610. (Reino Unido): 2015. ISSN 0095-8972

DOI: <https://doi.org/10.1080/00958972.2015.1077953>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 1.756

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 24

Num. revistas en cat.: 46

- 411** Murcia, C.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Streubel, R. On the nature of M CO(lone pair)···p(arene) interactions in the solid state of fluorinated oxaphosphirane complexes. 912697 - Crystengcomm. 17, pp. 6736 - 6743. (Reino Unido): 2015. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C5CE01331C>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 3.849

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 38

Num. revistas en cat.: 163

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Índice de impacto: 3.849

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 5

Num. revistas en cat.: 26

- 412** Bauza, A.; Frontera, A. pi-hole aerogen bonding interactions. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 17, pp. 24748 - 24753. (Reino Unido): 2015. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/C5CP03272E>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 4.449

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 32

Num. revistas en cat.: 144

Fuente de impacto: WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.449**Posición de publicación:** 6**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 35

- 413** Mirzaei, M.; Eshtiagh-Hosseini, H.; Shamsipur, M.; Saeedi, M.; Ardalani, M.; Bauza, A.; Mague, J. T.; Frontera, A.; Habibi, M. Importance of polarization assisted/resonance assisted hydrogen bonding interactions and unconventional interactions in crystal formations of five new complexes bearing chelidamic acid through proton transfer mechanism. 917082 - Rsc Advances. 5, pp. 72923 - 72936. (Reino Unido): 2015. ISSN 2046-2069

DOI: <https://doi.org/10.1039/C5RA09526C>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 3.289**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 49**Num. revistas en cat.:** 163

- 414** Das, M.; Ghosh, B. N.; Bauzá, A.; Rissanen, K.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Observation of novel oxygen... oxygen interaction in supramolecular assembly of cobalt (iii) Schiff base complexes: a combined experimental and computational study-. 917082 - Rsc Advances. 5, pp. 73028 - 73039. (Reino Unido): 2015. ISSN 2046-2069

DOI: <https://doi.org/10.1039/C5RA13960K>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 3.289**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 49**Num. revistas en cat.:** 163

- 415** Bhattacharyya, A.; Bhaumik, P.K.; Das, M.; Bauzá, A.; Jana, P.P.; Harms, K.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Synthesis, structure, magnetic property and self-assembly of two double end-on azide bridged ferromagnetic nickel (II) complexes with distinct bidentate blocking ligands: A combined experimental and theoretical study. 900768 - Polyhedron. 101, pp. 257 - 269. (Reino Unido): 2015. ISSN 0277-5387

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2015.08.026>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Índice de impacto:** 2.108**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 19**Num. revistas en cat.:** 46**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Índice de impacto:** 2.108**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 12**Num. revistas en cat.:** 26

- 416** Bauza, A.; Frontera, A. Competition between Halogen Bonding and π -Hole Interactions Involving Various Donors: The Role of Dispersion Effects. 910825 - Chemphyschem. 16, pp. 3108 - 3113. (Alemania): 2015. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.201500542>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Índice de impacto:** 3.138**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 50**Num. revistas en cat.:** 144

Fuente de impacto: WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.138**Posición de publicación:** 8**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 35

- 417** Mirzaei, M.; Eshtiagh-Hosseini, H.; Bazargan, M.; Mehrzad, F.; Shahbazi, M.; Mague, J. T.; Bauzá, A.; Frontera, A. Two new copper and nickel complexes of pyridine-2,6-dicarboxylic acid N-oxide and their proton transferred salts: Solid state and DFT insights. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 438, pp. 135 - 145. (Suiza): 2015. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2015.08.030>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1.918**Posición de publicación:** 22**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 46

- 418** Bauza, A.; Frontera, A. Theoretical study on the dual behaviour of XeO₃ and XeF₄ toward aromatic rings: Lone pair- π vs Aerogen- π interactions. 910825 - Chemphyschem. 16, pp. 3625. (Alemania): 2015. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.201500757>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.138**Posición de publicación:** 50**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 144**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.138**Posición de publicación:** 8**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 35

- 419** Servati-Gargari, M.; Seth, S. K.; LaDuca, R. L.; Yesilel, O. Z.; Pochodylo, A.; Bauzá, A.; Jana, B. C.; Arslan, T.; Frontera, A.; Mahmoudi, G. Solvent-controlled construction of manganese(II) complexes with 4-acetylpyridine nicotinoylhydrazone ligand. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 438, pp. 220 - 231. (Suiza): 2015. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2015.09.019>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1.918**Posición de publicación:** 22**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 46

- 420** Servati Gargari, M.; Stilinovic, V.; Bauza, A.; Frontera, A.; McArdle, P.; Van Derveer, D.; Ng, S. W.; Mahmoudi, G. Design of Lead(II) Metal Organic Frameworks Based on Covalent and Tetrel Bonding. 908895 - Chemistry-A European Journal. 21, pp. 17951. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2015. ISSN 0947-6539

DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201501916>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 5.771**Posición de publicación:** 24**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 163

- 421** Panja A.; Jana, N. Ch.; Patra M.; Brandao, P.; Moore, C. E.; Eichhorn, D. M.; Frontera, A. Valence tautomerism induced nucleophilic ipso substitution in a coordinated tetrabromocatecholate ligand and diverse catalytic activity mimicking the function of phenoxazinone synthase. 908997 - Journal of Molecular Catalysis A-Chemical. 412, pp. 56 - 66. (Holanda): 2015. ISSN 1381-1169
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molcata.2015.11.008>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.958
Posición de publicación: 37
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 144
- 422** Saha, S.; Sasmal, A.; Pilet, G.; Bauza, A.; Frontera, A.; Mitra, S. Unusual Nitrosyl π -Nitrosyl Interaction in Coordination Polymers of Ni(II) and Co(II) Complexes with α,ω -bis(benzotriazoloxo)alkane System. 912697 - Crystengcomm. 16, pp. 654 - 666. (Reino Unido): 2014. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/C3CE41765D>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147758>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.034
Posición de publicación: 32
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 157
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.034
Posición de publicación: 2
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 23
- 423** Mirzaei, M.; Eshtiagh-Hosseini, H.; Zarghami, S.; Bauza, A.; Frontera, A.; Mague, J.T.; Habibi M.; Shamsipur, M. Crystal engineering with coordination compounds of NiII, CoII, CrIII, and CdII bearing 2,6-dicarboxy-4-hydroxypyridine and 9-aminoacridine fragments driven by different nature of the face-to-face $\pi\cdots\pi$ stacking: X-ray structures, DFT calculations, and solution studies. 912697 - Crystengcomm. 16, pp. 1359 - 1377. (Reino Unido): 2014. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/C3CE41730A>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147572>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.034
Posición de publicación: 32
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 157
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.034
Posición de publicación: 2
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 23
- 424** Mirzaei, M.; Eshtiagh Hosseini, H.; Lotfian, N.; Reza Salimi, A.; Bauza, A.; Van Deun, R.; Decadt, R.; Barcelo-Oliver, M.; Frontera, A. Syntheses, structures, properties and DFT study of hybrid inorganic organic architectures constructed from trinuclear lanthanide frameworks and Keggin-type polyoxometalates. 912705 - Dalton Transactions. 43 - 4, pp. 1906 - 1916. (Reino Unido): 2014. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/C3DT51971F>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147615>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista

**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 9**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.197**Posición de publicación:** 6**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45

- 425** 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. (Reino Unido): 2014. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/C3CP54147A>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147519>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.493**Posición de publicación:** 32**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.493**Posición de publicación:** 6**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 139**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 34

- 426** Seth, P. Bauza, A.; Frontera, A.; Ghosh, A. Analyses of supramolecular interactions present in a coordination polymer of Mn(II) with 2-picolinate and 4,4'-Azobis(pyridine). 909947 - Inorganic Chemistry Communications. 41, pp. 1 - 5. (Holanda): 2014. ISSN 1387-7003

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.inoche.2013.12.015>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147575>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1.777**Posición de publicación:** 23**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 45

- 427** Inclán, M.; Albelda, M.T.; Carbonell, E.; Blasco, S.; Bauzá, A.; Frontera, A.; García-España, E. Molecular Recognition of Nucleotides in Water by Scorpion-type Receptors based on Nucleobase Discrimination. 908895 - Chemistry-A European Journal. 20, pp. 3730 - 3741. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2014. ISSN 0947-6539

DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201303861>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147576>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 5.731**Posición de publicación:** 22**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 157

- 428** Ghosh, A. K.; Pait, M.; Clerac, R.; Mathoniere, C.; Bertolasi, V.; Frontera, A.; Bauza, A.; Pramanik K.; Ray, D. A Dodecanuclear Copper(II) Cage Self-Assembled from Six Dicopper Building Units. 912705 - Dalton Transactions. 43, pp. 4076 - 4085. (Reino Unido): 2014. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C3DT53144A>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147617>

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.197**Posición de publicación:** 6**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45

- 429** Sasmal, A.; Bauza, A.; Frontera, A.; Rizzoli, C.; Desplanches, C.; Charbonniere, L. J.; Mitra, S. Relevant and Unprecedented C-H/sigma Supramolecular Interactions Involving sigma-Aromatic M₂X₂ Cores. 912705 - Dalton Transactions. 43, pp. 6195 - 6211. (Reino Unido): 2014. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C3DT52162A>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147618>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.197**Posición de publicación:** 6**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45

- 430** Cánaves, M.M.; Cabra, M.I.; Bauzá, A.; Cañellas, P.; Sánchez, K.; Orvay, F.; García-Raso, A.; Fiol, J.J.; Terrón, A.; Barceló-Oliver, M.; Ballester, P.; Mata, I.; Molins, E.; Hussain, F.; Frontera, A. Crystal Structures and DFT calculations of new chlorido-dimethylsulfoxide-M(III) (M= Ir, Ru, Rh) complexes with the N-pyrazolyl pyrimidine donor ligand: kinetic vs. thermodynamic isomers. 912705 - Dalton Transactions. 43 - 17, pp. 6353 - 6364. (Reino Unido): 2014. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2012.12.013>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/152231>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 15**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.197**Posición de publicación:** 6**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45

- 431** Biswas, R.; Diaz, C.; Bauzá, A.; Barceló-Oliver, M.; Frontera, A.; Ghosh, A. Triple-bridged ferromagnetic nickel(II) complexes derived from a tridentate NNO donor Schiff base ligand: A combined experimental and theoretical DFT study on stabilization and magnetic coupling. 912705 - Dalton Transactions. 43, pp. 6455 - 6467. (Reino Unido): 2014. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C3DT52764F>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147950>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.197**Posición de publicación:** 6**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45

- 432** Adriaenssens, L.V.; Gil-Ramírez, G.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Escudero-Adán, E.C.; Ballester, P. Thermodynamic Characterization of Halide-pi 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. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2014. ISSN 0002-7863

DOI: <https://doi.org/10.1021/ja412098v>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147814>

**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 12.113**Posición de publicación:** 10**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 157

- 433** Frontera, A.; Escudero, D.; Streubel, R. Electronic structure of N₂P₂ four-membered rings. 910825 - Chemphyschem. 15, pp. 1599 - 1603. (Alemania): 2014. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.201301233>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147815>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.419**Posición de publicación:** 41**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.419**Posición de publicación:** 7**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 139**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 34

- 434** Bauzá, A.; Streubel, R.; Frontera, A. On the Relationship between Ring Strain Energies and 'atoms-in-molecules' Properties in N₂P₂ Rings. 903311 - Chemical Physics Letters. 597, pp. 40 - 44. (Holanda): 2014. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2014.02.018>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147966>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1.897**Posición de publicación:** 83**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1.897**Posición de publicación:** 17**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 139**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 34

- 435** Hazari, A.; Das, L.K.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Ghosh, A. The influence of H-bonding on the 'ambidentate' coordination behaviour of thiocyanate ion to Cd(II): A combined experimental and theoretical study. 912705 - Dalton Transactions. 43, pp. 8007 - 8015. (Reino Unido): 2014. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C3DT53318B>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147621>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.197**Posición de publicación:** 6**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45

- 436** Maiti, M.; Sadhukhan, D.; Thakurta, S.; Zangrando, E.; Pilet, G.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Dede, B.; Mitra, S. Synthesis, Structural Characterization, Theoretical Calculations and Catecholase Mimetic Activity of Manganese-Schiff base Complexes. 900768 - Polyhedron. 75, pp. 45 - 49. (Reino Unido): 2014. ISSN 0277-5387
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2014.03.005>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147968>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.011
Posición de publicación: 19
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.011
Posición de publicación: 10
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 45
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 23
- 437** 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. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2014. ISSN 0947-6539
DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201304995>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147622>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 4
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.731
Posición de publicación: 22
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 157
- 438** Bauza, A.; Ramis, R.; Frontera, A. A Combined Theoretical and Cambridge Structural Database Study of π -hole Pnictogen Bonding Complexes Between Electron Rich Molecules and Both Nitro Compounds and Inorganic Bromides (YO_2Br , $Y = N, P$ and As). 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 118, pp. 2827 - 2834. (Estados Unidos de América): 2014. ISSN 1089-5639
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp502301n>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147581>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.693
Posición de publicación: 52
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.693
Posición de publicación: 10
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 139
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 34
- 439** Mirzaei, M.; Eshtiagh-Hosseini, H.; Mague, J. T.; Bauza, A.; Molcanov, K.; Frontera, A. Crystal engineering with coordination compounds of NiII, CoII, and CrIII bearing dipicolinic acid driven by different nature of noncovalent interactions. 912697 - Crystengcomm. 16, pp. 5352 - 5363. (Reino Unido): 2014. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/C4CE00325J>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147582>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.034
Posición de publicación: 32

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 157

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.034
Posición de publicación: 2

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 23

- 440** Mirzaei, M.; Eshtiagh-Hosseini, H.; Bauza, A.; Mague, J. T.; Ballester, P.; Frontera, A. On the importance of non covalent interactions in the structure of coordination Cu(II) and Co(II) complexes of pyrazine- and pyridine-dicarboxylic acid derivatives: Experimental and theoretical views. 912697 - Crystengcomm. 16, pp. 6149 - 6158. (Reino Unido): 2014. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C4CE00003J>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147623>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.034
Posición de publicación: 32

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 157

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.034
Posición de publicación: 2

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 23

- 441** Dhal, P.; Sasmal, A.; Pilet, G.; Gomez, C. J.; Bauza, A.; Frontera, A.; Mitra, S. Copper-assisted hemiacetal synthesis: a Cu(II) chain obtained by a one-step in situ reaction of picolinaldehyde. 910604 - European Journal of Inorganic Chemistry. pp. 3271 - 3278. (Desconocido): 2014. ISSN 1434-1948

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic.201402176>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147971>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.942
Posición de publicación: 9

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 45

- 442** Prohens, R.; Portell, A.; Font-Bardia, M.; Bauza, A.; Frontera, A. Experimental and theoretical study of aromaticity effects in the solid state architecture on squaric acid derivatives. 911335 - Crystal Growth & Design. 14, pp. 2587. (Estados Unidos de América): 2014. ISSN 1528-7483

DOI: <https://doi.org/10.1021/cg500264k>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147972>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.891
Posición de publicación: 24

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 157

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.891
Posición de publicación: 1

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 23

Fuente de impacto: WOS (JCR)



Índice de impacto: 4.891
Posición de publicación: 31

Categoría: MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 260

- 443** Bauza, A.; Ramis, R.; Frontera, A. Computational study of anion recognition based on tetrel and hydrogen bonding interaction by calix[4]pyrrole derivatives. 917110 - Computational And Theoretical Chemistry. 1038, pp. 67 - 70. (Holanda): 2014. ISSN 2210-271X

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2014.04.010>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147898>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.545

Posición de publicación: 95

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 139

- 444** Galan, A.; Escudero-Adán, E.C.; Frontera, A.; Ballester, P. Synthesis, Structure and Binding Properties of Lipophilic Cavitands based on a Calix[4]pyrrole-Resorcinarene Hybrid Scaffold. 900789 - Journal of Organic Chemistry. 79, pp. 5545 - 5557. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2014. ISSN 0022-3263

DOI: <https://doi.org/10.1021/jo5007224>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147915>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.721

Posición de publicación: 7

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 58

- 445** Bauzá, A.; Mooibroek, T.J.; Frontera, A. Small cycloalkane 1,1',2,2'-tetracyano structures are highly directional non-covalent carbon-bond donors. 908895 - Chemistry-A European Journal. 20, pp. 10245 - 10248. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2014. ISSN 0947-6539

DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.201403680>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147917>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.731

Posición de publicación: 22

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 157

- 446** Bauza, A.; Mooibroek, T.J.; Frontera, A. Influence of ring size on the strength of carbon bonding complexes between anions and perfluorocycloalkanes. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 16, pp. 19192 - 19197. (Reino Unido): 2014. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/C4CP01983K>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147498>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.493

Posición de publicación: 32

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 139

Fuente de impacto: WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.493**Posición de publicación:** 6**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 34

- 447** Khosravi, I.; Mirzaei, M.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Eftekhari, M. New Oxo Centered Basic p-Chlorobenzoate Bridging Heterotrimeric Complex, $[\text{Cr}_2\text{MnO}(\text{C}_7\text{H}_4\text{O}_2\text{Cl})_6(\text{Py})_3]\text{C}_7\text{H}_5\text{O}_2\text{Cl}$: Synthesis, X-ray Crystal Structure, and Theoretical DFT Study. 900768 - Polyhedron. 81, pp. 349 - 355. (Reino Unido): 2014. ISSN 0277-5387

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2014.06.036>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147611>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.011**Posición de publicación:** 19**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 45**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.011**Posición de publicación:** 10**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 23

- 448** Prankrishna Manna, S.; Seth, S. K.; Bauzá, A.; Mitra, M.; Choudhury, S. R.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. pH Dependent Formation of Unprecedented Water Bromide Cluster in the Bromide Salts of PTP Assisted by Anion- π Interactions: Synthesis, Structure, and DFT Study. 911335 - Crystal Growth & Design. 14, pp. 747 - 755. (Estados Unidos de América): 2014. ISSN 1528-7483

DOI: <https://doi.org/10.1021/cg401615r>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147919>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.891**Posición de publicación:** 24**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 157**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.891**Posición de publicación:** 1**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 23**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.891**Posición de publicación:** 31**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 260

- 449** Chakraborty, P.; Adhikary, S.; Samanta, S.; Escudero, D.; Castro, A. C.; Swart, M.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Ghosh, S.; Zangrando, E.; Das, D. Combined Experimental and Theoretical Investigation on Ligand and Anion Controlled Complex Formation with Unprecedented Structural Features and Photoluminescence Property of Zinc(II) Complexes. 911335 - Crystal Growth & Design. 14, pp. 4111 - 4123. (Estados Unidos de América): 2014. ISSN 1528-7483

DOI: <https://doi.org/10.1021/cg500717n>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147571>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 4.891
Posición de publicación: 24

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.891
Posición de publicación: 1

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.891
Posición de publicación: 31

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 157

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 23

Categoría: MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 260

- 450** Chakraborty, P.; Adhikary, J.; Sanyal, R.; Khan, A.; Manna, K.; Dey, S.; Zangrando, E.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Das, D. Role of ligand backbone of tridentate Schiff-base on complex nuclearity and bio-relevant catalytic activities of zinc(II) complexes: Experimental and theoretical investigations. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 421, pp. 364 - 373. (Suiza): 2014. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2014.06.018>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147748>

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.046
Posición de publicación: 17

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 45

- 451** Chakraborty, P.; Adhikary, J.; Ghosh, B.; Sanyal, R.; Chattopadhyay, S. K.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Zangrando, E.; Das, D. Relation between the Catalytic Efficiency of the Synthetic Analogues of Catechol Oxidase with Their Electrochemical Property in the Free State and Substrate-Bound State. 900752 - Inorganic Chemistry. 53, pp. 8257 - 8269. (Estados Unidos de América): 2014. ISSN 0020-1669

DOI: <https://doi.org/10.1021/ic5005177>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147908>

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.762
Posición de publicación: 4

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 45

- 452** Roy, S.; Bauzá, A.; Banik, R.; Biswas, S.C.; Frontera, A.; Das, S. Structural basis for molecular recognition, theoretical studies and anti-bacterial properties of three bis-uracil derivatives. 900806 - Tetrahedron. 70, pp. 6931 - 6937. (Reino Unido): 2014. ISSN 0040-4020

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.tet.2014.07.098>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147922>

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.641
Posición de publicación: 18

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 58

- 453** Orvay, F.; Bauzá, A.; Barceló-Oliver, M.; García-Raso, A.; Fiol, J.J.; Costa, A.; Molins, E.; Mata, I.; Frontera, A. Synthesis, X-Ray characterization and DFT studies of bis-N-imidazolylpyrimidine salts: the prominent role of hydrogen bonding and anion- π interactions. 912697 - Crystengcomm. 16 - 38, pp. 9043 - 9053. (Reino Unido): 2014. ISSN 1466-8033



DOI: <https://doi.org/10.1039/C4CE01425A>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152236>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.034

Posición de publicación: 32

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.034

Posición de publicación: 2

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 157

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 23

- 454** Manna, P.; Choudhury, S. R.; Mitra, M.; Seth, S. K.; Helliwell, M.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S.A combined experimental and theoretical study of the supramolecular self-assembly of Cu(II) malonate complex assisted by various weak forces and water dimer. 907668 - Journal of Solid State Chemistry. 220, pp. 149 - 156. (Estados Unidos de América): 2014. ISSN 0022-4596

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2014.08.019>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147573>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.133

Posición de publicación: 14

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.133

Posición de publicación: 72

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 45

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 139

- 455** Bauza, A.; Mooibroek, T.J.; Frontera, A. Non-covalent sp³ carbon bonding with ArCF₃ is analogous to CH-π interactions. 909184 - Chemical Communications. 50, pp. 12626 - 12629. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2014. ISSN 1359-7345

DOI: <https://doi.org/10.1039/C4CC05602G>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147761>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 6.834

Posición de publicación: 20

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 157

- 456** Manna, P.; Seth, S. K.; Mitra, M.; Choudhury, S. R.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Experimental and Computational Study of Counterintuitive ClO₄(-)...ClO₄(-) Interactions and the Interplay between π+...π and Anion...π+ Interactions. 911335 - Crystal Growth & Design. 14, pp. 5812 - 5821. (Estados Unidos de América): 2014. ISSN 1528-7483

DOI: <https://doi.org/10.1021/cg5014126>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147811>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.891

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 24**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.891**Posición de publicación:** 1**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.891**Posición de publicación:** 31**Num. revistas en cat.:** 157**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 23**Categoría:** MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 260

- 457** Bhattacharyya, A.; Bhaumik, P. K.; Jana, P.; Bauza, A.; Drew, M. G. B.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S.A combined experimental and computational study of supramolecular assemblies in ternary copper(II) complexes with a tetradentate N4 donor Schiff base and halides. 917082 - Rsc Advances. 4, pp. 58643 - 58651. (Reino Unido): 2014. ISSN 2046-2069

DOI: <https://doi.org/10.1039/C4RA09701G>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147577>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.84**Posición de publicación:** 33**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 157

- 458** Mitra, M.; Manna, P.; Bauza, A.; Ballester, P.; Seth, S.; Choudhury, S. R.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S.3-Picoline Mediated Self-assembly of M(II) Malonate Complexes (M = Ni/Co/Mn/Mg/Zn/Cu) Assisted by Various Weak Forces Involving Lone pair-pi, pi-pi and Anion...pi-hole Interactions. 909613 - Journal of Physical Chemistry B. 118, pp. 14713 - 14726. (Estados Unidos de América): 2014. ISSN 1520-6106

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp510075m>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147932>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.302**Posición de publicación:** 44**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 139

- 459** Bauza Riera, Antonio; Mooibroek, Tiddo Jonathan; Frontera Beccaria, Antonio. Directionality of π -holes in nitro compounds. 909184 - Chemical Communications. 51, pp. 1491 - 1493. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2014. Disponible en Internet en: <http://dx.doi.org/10.1039/C4CC09132A>. ISSN 1359-7345

DOI: <https://doi.org/10.1039/C4CC09132A>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/1762>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 3**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 6.834**Posición de publicación:** 20**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 157

- 460** Das, L.K.; Biswas, A.; Frontera, A.; Ghosh, A. Polymorphism in hetero-metallic tri-nuclear CuI_2CdII complexes of salicylaldimine ligand: Structural analysis and theoretical study. 900768 - Polyhedron. 52, pp. 1416 - 1424. (Reino Unido): 2013. ISSN 0277-5387



DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2012.04.029>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148328>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.047

Posición de publicación: 18

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.047

Posición de publicación: 9

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 44

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 23

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

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.36

Posición de publicación: 40

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.36

Posición de publicación: 7

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 136

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 33

- 462** Mitra, M.; Manna, P.; Seth, S.K.; Das, A.; Meredith, J.; Helliwell, M.; Bauza, A.; Choudhury, S.R.; Frontera, A.; Mukhopadhyay; Subrata. Salt-bridge- π (sb- π) interactions at work: associative interactions of sb- π , π - π and anion- π in Cu(II)-malonate-2-aminopyridine-hexafluoridophosphate ternary system. 912697 - Crystengcomm. 15 - 4, pp. 686 - 696. (Reino Unido): 2013. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C2CE26790J>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152222>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 10

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.858

Posición de publicación: 33

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.858

Posición de publicación: 4

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 148

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 23

- 463** 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. (Reino Unido): 2013. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/c2ce26741a>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148005>

**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 4**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.858**Posición de publicación:** 33**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.858**Posición de publicación:** 4**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 148**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 23

- 464** Mirzaei, M.; Eshtiagh-Hosseini, H.; Mohammadi Abadeh, M.; Chahkandi, M.; Frontera, A.; Hassanpoor, A. Influence of accompanying anions on supramolecular assembly and coordination geometry in HgII complexes with 8-aminoquinoline: experimental and theoretical studies. 912697 - Crystengcomm. 15, pp. 1404 - 1413. (Reino Unido): 2013. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C2CE26658J>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148006>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.858**Posición de publicación:** 33**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.858**Posición de publicación:** 4**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 148**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 23

- 465** Aragay, G.; Frontera, A.; Lloveras, V.; Vidal-Gancedo, J.; Ballester, P. The different nature of the interactions between anions and HAT(CN)₆: from reversible anion- π complexes to irreversible electron transfer processes (HAT(CN)₆ = 1,4,5,8,9,12-hexaazatriphenylene). 900665 - Journal of the American Chemical Society. 135, pp. 2620 - 2627. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2013. ISSN 0002-7863

DOI: <https://doi.org/10.1021/ja309960m>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148007>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 11.444**Posición de publicación:** 10**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 148

- 466** Ghosh, A.K.; Bauzá, A.; Bertolasi, V.; Frontera, A.; Ray, D. Dinuclear and Heptanuclear Nickel(II) Complexes: Anion Coordination Induced Ligand Arm Hydrolysis and Aggregation Around a Nickel(II) Core. 900768 - Polyhedron. 53, pp. 32 - 39. (Reino Unido): 2013. ISSN 0277-5387

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2013.01.009>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147639>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.047**Posición de publicación:** 18**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 44**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY



Índice de impacto: 2.047
Posición de publicación: 9

Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 23

- 467** Seth, P.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Massera, C.; Gamez, P.; Ghosh, A. Analysis of the contribution of the pi-acidity of the s-tetrazine ring in the crystal packing of coordination polymers. 912697 - Crystengcomm. 15, pp. 3031 - 3039. (Reino Unido): 2013. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/c3ce00058c>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147647>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.858

Posición de publicación: 33

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.858

Posición de publicación: 4

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 148

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 23

- 468** Mashraqui, S. H.; Betkar, R.; Ghorpade, S.; Frontera, A. A new benzimidazolium incorporated chemodosimeter affording dual chromogenic and fluorescence switch-on signaling for the selective targeting of cyanide. 910416 - Journal of Inclusion Phenomena and Macrocyclic Chemistry. 76, pp. 293 - 300. (Holanda): 2013. ISSN 0923-0750

DOI: <https://doi.org/10.1007/s10847-012-0198-5>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147653>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.426

Posición de publicación: 72

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 148

- 469** 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>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.991

Posición de publicación: 77

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 136

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.991

Posición de publicación: 17

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 33

- 470** Barceló-Oliver, M.; Baquero, B.; Bauzá, A.; García-Raso, A.; Terrón, A.; Mata, I.; Molins, E.; Frontera, A.; Vich, R. Experimental and theoretical studies on the coordination chemistry of the N1-hexyl substituted pyrimidines (uracil, 5-fluorouracil and cytosine). 912705 - Dalton Transactions. 42, pp. 7631 - 7642. (Reino Unido): 2013. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C3DT32922D>



Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148509>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.097

Posición de publicación: 6

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 44

- 471** 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. (Estados Unidos de América): 2013. ISSN 1089-5639

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.775

Posición de publicación: 50

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 136

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.775

Posición de publicación: 11

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 33

- 472** Tasada, A.; Albertí, F.M.; Bauzá, A.; Barceló-Oliver, M.; García-Raso, A.; Fiol, J.J.; Molins, E.; Caubet, A.; Frontera, A. Metallomacrocycles as anion receptors: combining hydrogen bonding and ion pair based hosts formed from Ag(I) salts and flexible bis- and tris-pyrimidine ligands. 909184 - Chemical Communications. 49, pp. 4944 - 4946. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2013. ISSN 1359-7345

DOI: <https://doi.org/10.1039/C3CC40772A>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152224>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 6.718

Posición de publicación: 20

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 148

- 473** Mitra, M.; Seth, S.K.; Choudhury, S.R.; Manna, P.; Das, A.; Helliwell, M.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S.M. (II)-malonate complexes (M = Mg, Cu, Ni and Co) characterized by layered structures: experimental observation, hirshfeld surface analysis and theoretical study. 910604 - European Journal of Inorganic Chemistry. 2013 - 26, pp. 4679 - 4685. (Desconocido): 2013. ISSN 1434-1948

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic.201300459>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152225>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.965

Posición de publicación: 10

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 44



- 474** Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M.; Frontera, A. Anion- π interactions in [S₄N₃]⁺ rings. 900672 - New Journal of Chemistry. 37, pp. 2636 - 2641. (Francia): 2013. ISSN 1144-0546
DOI: <https://doi.org/10.1039/C3NJ00424D>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148663>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.159
Posición de publicación: 40
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 148
- 475** Ghosh, S.; Biswas, S.; Bauzá, A.; Barceló-Oliver, M.; Frontera, A.; Ghosh A. Use of metalloligands [CuL] (H₂L = salen type di-Schiff bases) in the formation of heterobimetallic copper(II)-uranyl complexes: Photo-physical investigations, structural variations and theoretical calculations. 900752 - Inorganic Chemistry. 52 - 13, pp. 7508 - 7523. (Estados Unidos de América): 2013. ISSN 0020-1669
DOI: <https://doi.org/10.1021/ic400422d>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148018>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.794
Posición de publicación: 4
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 44
- 476** Biswas, R.; Diaz, C.; Bauzá, A.; Frontera, A.; Ghosh A. Synthesis, Crystal Structure, Magnetic Property and DFT Calculations of an Unusual Dinuclear μ_2 -Alkoxido Bridged Iron(III) Complex. 912705 - Dalton Transactions. 42, pp. 12274 - 12283. (Reino Unido): 2013. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/C3DT51153G>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148038>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 9
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.097
Posición de publicación: 6
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 44
- 477** Mitra, M.; Manna, P.; Das, A.; Seth, S. K.; Helliwell, M.; Bauza, A.; Choudhury, S. R.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. On the Importance of Unprecedented Lone Pair Salt Bridge Interactions in Cu(II)-Malonate - 2-Amino-5-Chloropyridine Perchlorate Ternary System. 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 117, pp. 5802 - 5811. (Estados Unidos de América): 2013. ISSN 1089-5639
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp4046066>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148473>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.775
Posición de publicación: 50
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.775
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 136
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 11

Num. revistas en cat.: 33

- 478** Sasmal, A.; Saha, S.; Gomez Garcia, C.J.; Desplanches, C.; Garribba, E.; Bauza, A.; Frontera, A.; Scott, R.; Butcher, R.J.; Mitra, S. Reversible Switching of the Electronic Ground State in a Pentacoordinated Copper(II) Complex. 909184 - Chemical Communications. 49 - 71, pp. 7806 - 7808. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2013. ISSN 1359-7345

DOI: <https://doi.org/10.1039/C3CC44276D>Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152227>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 10

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 6.718

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 20

Num. revistas en cat.: 148

- 479** 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. (Alemania): 2013. ISSN 1861-4728

DOI: <https://doi.org/10.1002/asia.201300786>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 3.935

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 32

Num. revistas en cat.: 148

- 480** Barceló-Oliver, M.; Bauzá, A.; Baquero, B. A.; García-Raso, A.; Terrón, A.; Molins E.; Frontera, A. Experimental and theoretical study of N1-hexylcytosine and N1-hexylcytosinium nitrate: the crucial role of hydrophobic and anion π interactions. 900807 - Tetrahedron Letters. 54, pp. 5355 - 5360. (Reino Unido): 2013. ISSN 0040-4039

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2013.07.099>Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147631>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC

Índice de impacto: 2.391

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 24

Num. revistas en cat.: 58

- 481** Bauzá, A.; Mooibroek, T.J.; Frontera, A. Tetrel bonding interaction: a rediscovered supramolecular force?. 900624 - Angewandte Chemie-International Edition. 52 - 47, pp. 12317 - 12321. (Alemania): 2013. ISSN 1433-7851

DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.201306501>Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147911>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 11.336

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 11

Num. revistas en cat.: 148

- 482** Degtyarenko, A.S.; Rusanov, E.B.; Bauza, A.; Frontera, A.; Krautscheid, H.; Chernega, A.N.; Mokhir, A.A.; Domasevitch, K.V. Self-assembly cavitand precisely recognizing hexafluorosilicate: a concerted action of two coordination and twelve CH...F bonds. 909184 - Chemical Communications. 49 - 79, pp. 9018 - 9020. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2013. ISSN 1359-7345
DOI: <https://doi.org/10.1039/c3cc45271a>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152228>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 6.718
Posición de publicación: 20
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 148
- 483** Bauza, A.; Alkorta, I.; Frontera, A.; Elguero, J. On the reliability of pure and hybrid DFT methods for the evaluation of halogen, chalcogen and pnictogen bonds involving anionic and neutral electron donors. 913200 - Journal Of Chemical Theory And Computation. 9 - 11, pp. 5201 - 5210. (Estados Unidos de América): 2013. ISSN 1549-9618
DOI: <https://doi.org/10.1021/ct400818v>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152229>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 4
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.31
Posición de publicación: 25
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 136
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.31
Posición de publicación: 3
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 33
- 484** Adhikary, J.; Chakraborty, P.; Das, S.; Chattopadhyay, T.; Bauzá, A.; Chattopadhyay, S.K.; Ghosh, B.; Mautner, F.A.; Frontera, A.; Das, D.A. Combined Experimental and Theoretical Investigation on the Role of Halide Ligands on the Catecholase-like Activity of Mononuclear Nickel(II) Complexes with a Phenol-Based Tridentate Ligand. 900752 - Inorganic Chemistry. 52 - 23, pp. 13442 - 13452. (Estados Unidos de América): 2013. ISSN 0020-1669
DOI: <https://doi.org/10.1021/ic401819t>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147616>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.794
Posición de publicación: 4
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 44
- 485** 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>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 4
Nº total de autores: 4
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL



Índice de impacto: 2.145
Posición de publicación: 67

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.145
Posición de publicación: 13

Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 135

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 34

- 486** Torres, M.; Cañellas, P.; Estarellas, C.; García-Raso, A.; Fiol, J.J.; Albertí, F.M.; Frontera, A.; Molins, E.; Mata, I.; Deyà, P.M. Synthesis, X-ray characterization and computational Studies of N-imidazolyl and N-pyrazolyl pyrimidine derivatives. 900806 - Tetrahedron. 68, pp. 2374 - 2382. (Reino Unido): 2012. ISSN 0040-4020

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.tet.2012.01.023>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148289>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 7

Nº total de autores: 10

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.803

Posición de publicación: 18

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 57

- 487** Kar, P.; Biswas, R.; Drew, M.G.B.; Frontera, A.; Ghosh, A. Host-Guest Supramolecular Interactions in the Coordination Compounds of 4,4'-Azobis(pyridine) with MnX_2 ($X = NCS^-$, NCN^- , and PF_6^-): Structural Analyses and Theoretical Study. 900752 - Inorganic Chemistry. 51, pp. 1837 - 1851. (Estados Unidos de América): 2012. ISSN 0020-1669

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148326>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.593

Posición de publicación: 5

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 44

- 488** Manna, P.; Seth, S.K.; Das, A.; Hemming, J.; Prendergast, R.; Helliwell, M.; Choudhury, S.R.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Anion Induced Formation of Supramolecular Associations Involving Lone pair- π and Anion- π Interactions in Co(II) Malonate Complexes: Experimental Observations, Hirshfeld Surface Analyses and DFT Studies. 900752 - Inorganic Chemistry. 51, pp. 3557 - 3571. (Estados Unidos de América): 2012. ISSN 0020-1669

DOI: <https://doi.org/10.1021/ic202317f>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148203>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 9

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.593

Posición de publicación: 5

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 44

- 489** 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>

**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 4**Nº total de autores:** 4**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.145**Posición de publicación:** 67**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.145**Posición de publicación:** 13**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 135**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 34

- 490** 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>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 4**Nº total de autores:** 4**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.233**Posición de publicación:** 63**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 135

- 491** Cañellas, P.; Torres, M.; Bauzá, A.; Cánaves, M.; Sánchez, K.; Cabra, M.I.; García-Raso, A.; Fiol, J.J.; Deyà, P.M.; Molins, E.; Mata, I.; Frontera, A. Complexes of Zn(II) with N-Imidazolyl and -pyrazolyl pyrimidine Donor Ligands: Synthesis, Crystal Structure and Theoretical Study. 910604 - European Journal of Inorganic Chemistry. 2012 - 25, pp. 3995 - 4003. (Desconocido): 2012. ISSN 1434-1948

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic.201200379>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/152218>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 12**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.12**Posición de publicación:** 11**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 44

- 492** Biswas, A.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Ballester, P.; Drew, M. G. B.; Gamez, P.; Ghosh, A. Effect of a methyl group on the spontaneous resolution of a square-pyramidal coordination compound: crystal packing and conglomerate formation. 912697 - Crystengcomm. 14 - 18, pp. 5854 - 5861. (Reino Unido): 2012. ISSN 1466-8033

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147973>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.879**Posición de publicación:** 33**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 152**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.879**Posición de publicación:** 3**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 23

- 493** Barceló-Oliver, M.; Baquero, B.; Bauzá, A.; García-Raso, A.; Terrón, A.; Mata, I.; Molins, E.; Frontera, A. Experimental and theoretical study of thymine and cytosine derivatives: the crucial role of weak noncovalent interactions. 912697 - Crystengcomm. 2012 - 14, pp. 5777 - 5784. (Reino Unido): 2012. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/c2ce25580d>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152219>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Nº total de autores: 8
Revista dentro del 25%: Si
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.879
Num. revistas en cat.: 152
Posición de publicación: 33
Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.879
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 3
Num. revistas en cat.: 23
- 494** Cañellas, P.; Bauzá, A.; García-Raso, A.; Fiol, J.J.; Deyà, P.M.; Molins, E.; Mata, I.; Frontera, A. Synthesis, X-ray characterization and computational studies of Cu(II) complexes of N-pyrazolyl pyrimidine. 912705 - Dalton Transactions. 41 - 36, pp. 11161 - 11169. (Reino Unido): 2012. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/c2td31162c>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147610>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Nº total de autores: 8
Revista dentro del 25%: Si
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.806
Num. revistas en cat.: 44
Posición de publicación: 8
- 495** 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. (Estados Unidos de América): 2012. ISSN 1932-7447
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp306586f>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147900>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.814
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 135
Posición de publicación: 28
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.814
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 27
Num. revistas en cat.: 241
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.814
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 19
Num. revistas en cat.: 69

- 496** Brooker, S.; White, N.G.; Bauzá, A.; Deyà, P.M.; Frontera, A. Understanding the Forces That Govern Packing: A Density Functional Theory and Structural Investigation of Anion- π -Anion and Nonclassical C-H $\cdots$ Anion Interactions. 900752 - Inorganic Chemistry. 51 - 19, pp. 10334 - 10340. (Estados Unidos de América): 2012. ISSN 0020-1669
DOI: <https://doi.org/10.1021/ic30146881>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147589>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 5
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.593
Posición de publicación: 5
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 44
- 497** Biswas, A.; Drew, M.G.B.; Diaz, C.; Bauza, A.; Frontera, A.; Ghosh, A. Cis-trans isomerism in diphenoxido bridged dicopper complexes: role of crystallized water to stabilize the cis isomer, variation in magnetic properties and conversion of both into a trinuclear species. 912705 - Dalton Transactions. 2012 - 41, pp. 12200 - 12212. (Reino Unido): 2012. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/C2DT31277H>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152220>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.806
Posición de publicación: 8
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 44
- 498** Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M.; Frontera, A. Pnictogen- π complexes: theoretical study and biological implications. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 14 - 40, pp. 14061 - 14066. (Reino Unido): 2012. ISSN 1463-9076
DOI: <https://doi.org/10.1039/c2cp42672b>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147982>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 4
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.829
Posición de publicación: 32
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 135
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.829
Posición de publicación: 6
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 34
- 499** Bauza, A.; Quinonero, D.; Deya, P.M.; Frontera, A. Theoretical ab initio study of lone pair and anion- π 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>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Tipo de soporte: Revista



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.139
Posición de publicación: 105

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 135

- 500** Quinonero, D.; Frontera, A.; Deya, P.M. Interplay between ion- π and Ar/ π 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>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.139

Posición de publicación: 105

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 135

- 501** Das, L.K.; Kadam, R.M.; Bauza, A.; Frontera, A.; Ghosh, A. Differences in Nuclearity, Molecular Shapes, and Coordination Modes of Azide in the Complexes of Cd(II) and Hg(II) with a 'Metalloligand' [CuL] (H₂L = N,N'-Bis(salicylidene)-1,3-propanediamine): Characterization in Solid and in Solutions, and Theoretical Calculations. 900752 - Inorganic Chemistry. 51 - 22, pp. 12407 - 12418. (Estados Unidos de América): 2012. ISSN 0020-1669

DOI: <https://doi.org/10.1021/ic301773h>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147634>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.593

Posición de publicación: 5

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 44

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

DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.201005635>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152197>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 11.829

Posición de publicación: 7

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 151

- 503** Mashraqui, S.H.; Betkar, R.; Chandiramani, M.; Estarellas, C.; Frontera, A. Design of a dual sensing highly selective cyanide chemodosimeter based on pyridinium ring chemistry. 900672 - New Journal of Chemistry. 35, pp. 57 - 60. (Francia): 2011. ISSN 1144-0546

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

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152199>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.006

Posición de publicación: 44

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 151

- 504** 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. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2011. ISSN 1359-7345

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 10

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 5.504

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 19

Num. revistas en cat.: 151

- 505** 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. (Polonia): 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>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 1.065

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 90

Num. revistas en cat.: 151

- 506** Lucas, X.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M. The Role of the Ethynyl Substituent on the pi-pi Stacking Affinity of Benzene: A Theoretical Study. 910825 - Chemphyschem. 12 - 2, pp. 283 - 288. (Alemania): 2011. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.201000891>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152201>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 3.453

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 38

Num. revistas en cat.: 129

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Índice de impacto: 3.453

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 6

Num. revistas en cat.: 33

- 507** Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Theoretical ab initio study of substituted benzene trimer: Interplay between hydrogen bonding and $\pi\cdots\pi$ 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>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

**Nº total de autores:** 4**Fuente de impacto:****Índice de impacto:** 3.453**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No

- 508** 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. (Reino Unido): 2011. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/C0CP01894E>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147570>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Índice de impacto:** 3.453**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 34**Num. revistas en cat.:** 129**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Índice de impacto:** 3.453**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 5**Num. revistas en cat.:** 33

- 509** Barceló-Oliver, M.; Estarellas, C.; Terrón, A.; García-Raso, A.; Frontera, A. RNAs' uracil quartet model with a non-essential metal ion. 909184 - Chemical Communications. 47 - 16, pp. 4646 - 4648. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2011. ISSN 1359-7345

DOI: <https://doi.org/10.1039/C1CC10376H>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/152212>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 3.453**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 19**Num. revistas en cat.:** 151

- 510** 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>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 4**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Índice de impacto:** 3.453**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 56**Num. revistas en cat.:** 129**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Índice de impacto:** 3.453**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 12**Num. revistas en cat.:** 33

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

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto:

Índice de impacto: 3.453

Fuente de impacto:

Índice de impacto: 3.453

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Categoría: MATHEMATICAL & COMPUTATIONAL BIOLOGY

Revista dentro del 25%: Si

- 512** Biswas, R.; Drew, M.G.B.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Ghosh, A. Synthesis and crystal structures of μ -oxido- and μ -hydroxido-bridged dinuclear iron(III) complexes with an N2O donor ligand - a theoretical study on the influence of weak forces on the Fe-O-Fe bridging angle. 910604 - European Journal of Inorganic Chemistry. 2011 - 16, pp. 2558 - 2566. (Desconocido): 2011. ISSN 1434-1948

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic.201100032>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152213>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.453

Posición de publicación: 12

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 44

- 513** Seth, S.K.; Saha, I.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Kar, T.; Mukhopadhyay, S. Supramolecular self-assembly of M-IDA complexes involving lone pair center dot center dot center dot π interactions: crystal structures, Hirshfeld surface analysis, and DFT calculations [H(2)IDA = iminodiacetic acid, M = Cu(II), Ni(II)]. 911335 - Crystal Growth & Design. 11, pp. 3250 - 3265. (Estados Unidos de América): 2011. ISSN 1528-7483

DOI: <https://doi.org/10.1021/cg200506q>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147640>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.453

Posición de publicación: 24

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 151

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.453

Posición de publicación: 4

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 25

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.453

Posición de publicación: 24

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 230

- 514** 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. (Estados Unidos de América): 2011. ISSN 1089-5639



DOI: <https://doi.org/10.1021/jp2038416>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147920>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.453

Posición de publicación: 46

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.453

Posición de publicación: 9

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 129

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 33

- 515** 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. (Alemania): 2011. ISSN 1439-4235

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.453

Posición de publicación: 38

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.453

Posición de publicación: 6

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 129

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 33

- 516** Das, A.; Choudhury, S. R.; Estarellas, C.; Dey, B.; Frontera, A.; Hemming, J.; Helliwell, M.; Gamez, P.; Mukhopadhyay, S. Supramolecular assemblies involving anion- π and lone pair- π interactions: experimental observation and theoretical analysis. 912697 - Crystengcomm. 13 - 14, pp. 4519 - 4527. (Reino Unido): 2011. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/c0ce00593b>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147646>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 5

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.84

Posición de publicación: 31

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.84

Posición de publicación: 5

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 151

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 25

- 517** Garau, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Russo, N.; Deya, P.M. RI-MP2 and MPWB1K Study of π -Anion- π Complexes: MPWB1K Performance and Some Additivity Aspects. 913200 - Journal Of Chemical Theory And Computation. 50 - 2, pp. 415 - 418. (Estados Unidos de América): 2011. ISSN 1549-9618



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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.22

Posición de publicación: 22

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.22

Posición de publicación: 2

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 129

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 33

- 518** Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Radical cation (C(·+)-pi) and radical anion (A(·-)-pi) interactions with aromatic rings: energetic, orbitalic and spin density considerations. 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics. 13 - 37, pp. 16698 - 16705. (Reino Unido): 2011. ISSN 1463-9076

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.57

Posición de publicación: 34

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.57

Posición de publicación: 5

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 129

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 33

- 519** 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. (Reino Unido): 2011. ISSN 1477-9226

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 6

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.84

Posición de publicación: 7

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 44

- 520** Mashraqui, S.H.; Chandiramani, M.A.; Ghorpade, S.S.; Estarellas, C.; Frontera, A. A highly selective fluorescence turn-on probe for Zn²⁺ based on new diaryloxadiazole chelate. 900643 - Chemistry Letters. 40 - 10, pp. 1163 - 1164. (Japón): 2011. ISSN 0366-7022

DOI: <https://doi.org/10.1246/cl.2011.1163>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 6

Nº total de autores: 5

Tipo de soporte: Revista



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.59
Posición de publicación: 65

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 151

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

DOI: <https://doi.org/10.1002/asia.201100285>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152217>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 4.5

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 27

Num. revistas en cat.: 151

- 522** 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. (Reino Unido): 2011. ISSN 1463-9076

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 3.57

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 34

Num. revistas en cat.: 129

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Índice de impacto: 3.57

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 5

Num. revistas en cat.: 33

- 523** 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. (Reino Unido): 2010. ISSN 0040-4039

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC

Índice de impacto: 2.618

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 20

Num. revistas en cat.: 56

- 524** 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. (Desconocido): 2010. ISSN 1434-1948

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



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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 14

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.732

Posición de publicación: 11

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 43

- 525** 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. (Reino Unido): 2010. ISSN 1466-8033

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.006

Posición de publicación: 29

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 145

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.006

Posición de publicación: 6

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 25

- 526** 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>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.28

Posición de publicación: 59

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 125

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.28

Posición de publicación: 11

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 32

- 527** Hazra, S.; Sarkar, B.; Naiya, S.; Drew, M. G. B.; Frontera, A.; Escudero, D.; Ghosh, A. Self-Assembled Molecular Complexes and Coordination Polymers of CdII, Hexamine, and Monocarboxylates: Structural Analysis and Theoretical Studies of Supramolecular Interactions. 911335 - Crystal Growth & Design. 10 - 4, pp. 1677 - 1687. (Estados Unidos de América): 2010. ISSN 1528-7483

DOI: <https://doi.org/10.1021/cg901245z>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147612>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 1.737
Posición de publicación: 23

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.737
Posición de publicación: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.737
Posición de publicación: 24

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 145

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 25

Categoría: MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 222

- 528** Das, A.; Choudhury, Somnath R.; Dey, B.; Yalamanchili, S. K.; Helliwell, M.; Gamez, P.; Mukhopadhyay, S.; Estarellas, C.; Frontera, A. Supramolecular assembly of Mg(II) complexes directed by associative lone pair- π / π - π /anion- π /lone pair interactions. 909613 - Journal of Physical Chemistry B. 114 - 15, pp. 4998 - 5009. (Estados Unidos de América): 2010. ISSN 1520-6106

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp911884x>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147974>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.603
Posición de publicación: 32

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 125

- 529** 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. 489 - 4-6, pp. 254 - 258. (Holanda): 2010. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2010.03.004>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147899>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.28
Posición de publicación: 59

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 125

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.28
Posición de publicación: 11

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR &
CHEMICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 32

- 530** 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. (Alemania): 2010. ISSN 1432-881X

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL



Índice de impacto: 2.903
Posición de publicación: 43

Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 125

- 531** Mashraqui, S.H.; Betkar, R.; Chandiramani, M.; Poonia, K.; Quinonero, 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. (Reino Unido): 2010. ISSN 1061-0278

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 1.94

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 47

Num. revistas en cat.: 145

- 532** 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. (Desconocido): 2010. ISSN 1434-1948

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 14

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 2.909

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 11

Num. revistas en cat.: 43

- 533** Naiya, S.; Drew, M.G.B.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Ghosh, A. Hydrogen-bond assisted stabilization of the less favored conformation of a tridentate Schiff base ligand in dinuclear nickel(II) complex: An experimental and theoretical study. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 363 - 14, pp. 3904 - 3913. (Suiza): 2010. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2010.07.058>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147633>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 1.899

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 21

Num. revistas en cat.: 43

- 534** 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. (Reino Unido): 2010. ISSN 1466-8033

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 9



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.006
Posición de publicación: 29

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 145

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.006
Posición de publicación: 6

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 25

- 535** 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. (Desconocido): 2010. ISSN 1434-1948

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 14

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 2.941

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 11

Num. revistas en cat.: 43

- 536** Biswas, S.; Naiya, S.; Drew, M.G.B.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Ghosh, A. Trinuclear and tetranuclear adduct formation between sodium perchlorate and copper(II) complexes of salicylaldimine type ligands: structural characterization and theoretical investigation. 900754 - Inorganica Chimica Acta. 366, pp. 219 - 226. (Suiza): 2010. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2010.11.005>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147992>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 2.322

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 21

Num. revistas en cat.: 43

- 537** 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. (Estados Unidos de América): 2009. ISSN 0192-8651

DOI: <https://doi.org/10.1002/jcc.21031>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152189>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 3.769

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 28

Num. revistas en cat.: 140

- 538** 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>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.291

Posición de publicación: 51

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.291

Posición de publicación: 12

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 121

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 33

- 539** García-Raso, A.; Albertí, F.M.; Fiol, J.J.; Tasada, A.; Barceló-Oliver, M.; Molins, E.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, 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. (Estados Unidos de América): 2009. ISSN 1528-7483

DOI: <https://doi.org/10.1021/cg801245g>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148322>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 10

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.162

Posición de publicación: 23

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.162

Posición de publicación: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.162

Posición de publicación: 23

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 140

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 25

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 214

- 540** 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. (Estados Unidos de América): 2009. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp811345e>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148510>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.899

Posición de publicación: 39

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.899

Posición de publicación: 8

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 121

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 33

- 541** 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. (Estados Unidos de América): 2009. ISSN 1549-9618

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.804

Posición de publicación: 18

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.804

Posición de publicación: 2

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 121

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 33

- 542** 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. (Alemania): 2009. ISSN 1432-881X

DOI: <https://doi.org/10.1007/s00214-009-0517-0>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148556>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.584

Posición de publicación: 45

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 121

- 543** Gural'skiy, Il'ya A.; Escudero, D.; Frontera, A.; Solntsev, P.V.; Rusanov, E.B.; Chernega, A.N.; Krautscheid, H.; Domasevitch, K.V. 1,2,4,5-Tetrazine: an unprecedented μ_4 -coordination that enhances ability for anion- π interactions. 912705 - Dalton Transactions. 15, pp. 2856 - 2864. (Reino Unido): 2009. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/B818125J>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148523>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.081

Posición de publicación: 7

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 44

- 544** Estarellas, C.; Rotger, M.C.; Capó, M.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Costa, A.; Deyà, P.M. Anion- π interactions in four-membered rings. 910471 - Organic Letters. 11 - 9, pp. 1987 - 1990. (Estados Unidos de América): 2009. ISSN 1523-7060

DOI: <https://doi.org/10.1021/ol900470r>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148524>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Tipo de soporte: Revista



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.42
Posición de publicación: 4

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 57

- 545** Biswas, C.; Drew, M.G.B.; Escudero, D.; Frontera, A.; Ghosh, A. Anion- π , Lone-Pair- π , π - π and Hydrogen-Bonding Interactions in a CuII Complex of 2-Picolinate and Protonated 4,4'-Bipyridine: Crystal Structure and Theoretical Studies. 910604 - European Journal of Inorganic Chemistry. 2009 - 15, pp. 2238 - 2246. (Desconocido): 2009. ISSN 1434-1948

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejic.200900110>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152190>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.941

Posición de publicación: 11

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 44

- 546** 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. (Estados Unidos de América): 2009. ISSN 1089-5639

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.899

Posición de publicación: 39

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 121

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.899

Posición de publicación: 8

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 33

- 547** 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. (Alemania): 2009. ISSN 1439-4235

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.453

Posición de publicación: 33

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 121

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.453

Posición de publicación: 5

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 33

- 548** Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Interplay between cation-pi 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>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 4
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.291
Posición de publicación: 51
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.291
Posición de publicación: 12
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 121
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 33
- 549** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Escudero, D.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P.M. MP2 Study of Synergistic Effects Between X-H/pi (X=C,N,O) and pi-pi Interactions. 909714 - Theoretical Chemistry Accounts. 120 - 4-6, pp. 385 - 393. (Alemania): 2008. ISSN 1432-881X
DOI: <https://doi.org/10.1007/s00214-008-0416-9>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152174>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.37
Posición de publicación: 43
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 113
- 550** Estarellas, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Ballester, P.; Morey, J.; Costa, A.; Deyà, P.M. MP2 study of the dual sigma/pi anion-binding affinity of fluorinated phthalic acid anhydrides. 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 112 - 7, pp. 1622 - 1626. (Estados Unidos de América): 2008. ISSN 1089-5639
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp710572f>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147636>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 7
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.871
Posición de publicación: 33
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.871
Posición de publicación: 7
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 113
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 31
- 551** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M. High-Level Ab Initio Study of Anion-pi Interactions in Pyridine and Pyrazine Rings Coordinated to Ag(I). 910825 - Chemphyschem. 9 - 3, pp. 397 - 399. (Alemania): 2008. ISSN 1439-4235
DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.200700788>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152186>

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 3**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.636**Posición de publicación:** 25**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.636**Posición de publicación:** 3**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 113**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 31

- 552** 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. (Alemania): 2008. ISSN 1434-193X

DOI: <https://doi.org/10.1002/ejoc.200701209>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/152187>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 8**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.016**Posición de publicación:** 13**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, ORGANIC**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 55

- 553** 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>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 4**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.169**Posición de publicación:** 47**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 113**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.169**Posición de publicación:** 11**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 31

- 554** 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>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 4**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL



Índice de impacto: 2.169
Posición de publicación: 47

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.169
Posición de publicación: 11

Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 113

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 31

- 555** 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. (Estados Unidos de América): 2008. ISSN 0020-1669

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.147

Posición de publicación: 4

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 43

- 556** 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. (Estados Unidos de América): 2008. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp802370s>

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.871

Posición de publicación: 33

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 113

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.871

Posición de publicación: 7

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 31

- 557** 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. (Estados Unidos de América): 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>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 4

Tipo de soporte: Revista

- 558** 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>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.169

Posición de publicación: 47

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.169

Posición de publicación: 11

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 113

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 31

- 559** Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. Theoretical and crystallographic study of the dual sigma/pi anion binding affinity of quinolizinylium cation. 913200 - Journal Of Chemical Theory And Computation. 4, pp. 1981 - 1989. (Estados Unidos de América): 2008. ISSN 1549-9618

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.274

Posición de publicación: 17

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 125

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.651

Posición de publicación: 28

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 127

- 561** Garau, C.; Quinonero D.; Frontera, A.; Escudero, D.; Ballester, P.; Costa A.; Deya P.M. MP2 study of anion-pi 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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.207

Posición de publicación: 42

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.207

Posición de publicación: 12

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 110

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 32

- 562** 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. (Estados Unidos de América): 2007. ISSN 1089-5639
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp070324a>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147983>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.918
Posición de publicación: 28
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.918
Posición de publicación: 6
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 110
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 32
- 563** Quinonero D.; Frontera, A.; Escudero, D.; Ballester, P.; Costa A.; Deya P.M. A theoretical study of anion-pi interactions in seven-membered rings. 910825 - Chemphyschem. 8 - 8, pp. 1182 - 1187. (Alemania): 2007. ISSN 1439-4235
DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.200700100>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147985>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.502
Posición de publicación: 23
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.502
Posición de publicación: 2
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 110
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 32
- 564** 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-pi Complexes. 913200 - Journal Of Chemical Theory And Computation. 3 - 6, pp. 2098 - 2107. (Estados Unidos de América): 2007. ISSN 1549-9618
DOI: <https://doi.org/10.1021/ct700122y>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147990>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.308
Posición de publicación: 16
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 127
- 565** 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-pi interactions in bis(pyrimidine) salts. 910608 - European Journal of Organic Chemistry. 2007 - 35, pp. 5821 - 5825. (Alemania): 2007. ISSN 1434-193X
DOI: <https://doi.org/10.1002/ejoc.200700809>



Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152175>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 10

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.914

Posición de publicación: 13

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 56

- 566** 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. (Estados Unidos de América): 2007. ISSN 0020-1669

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 10

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.123

Posición de publicación: 4

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 43

- 567** 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>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.462

Posición de publicación: 34

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 108

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.462

Posición de publicación: 9

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 31

- 568** 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>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.462

Posición de publicación: 34

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 108

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.462**Posición de publicación:** 9**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 31

- 569** 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. (Estados Unidos de América): 2006. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp056976l>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148290>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.047**Posición de publicación:** 25**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 108**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.047**Posición de publicación:** 5**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 31

- 570** Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P. M.; Frontera, A.; Gomila, R. M.; Oliva, A. I.; Hunter, C. A. DABCO-induced Self-assembly of a tris-Porphyrin Double Decker Cage: Thermodynamic Characterization and Guest Recognition. 900665 - Journal of the American Chemical Society. 128 - 16, pp. 5560 - 5569. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2006. ISSN 0002-7863

DOI: <https://doi.org/10.1021/ja060608t>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148292>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 7.696**Posición de publicación:** 7**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 124

- 571** Frontera, A.; Quinoñero, 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>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.462**Posición de publicación:** 34**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 108**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.462**Posición de publicación:** 9**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 31

- 572** Frontera, A.; Quinonero, D.; Garau, C.; Costa, A.; Ballester, P. i Deyà, P.M. MP2 Study of Cation-(π)n- π Interactions ($n = 1-4$). 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 110, pp. 9307 - 9309. (Estados Unidos de América): 2006. ISSN 1089-5639
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp062176e>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147624>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.047
Posición de publicación: 25
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.047
Posición de publicación: 5
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 108
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 31
- 573** 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. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2006. ISSN 0022-3263
DOI: <https://doi.org/10.1021/jo0609327>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147586>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 9
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.79
Posición de publicación: 7
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 56
- 574** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Garau, C.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P.M. Interplay Between Cation- π , Anion- π and π - π Interactions. 910825 - Chemphyschem. 7 - 12, pp. 2487 - 2491. (Alemania): 2006. ISSN 1439-4235
DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.200600343>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152164>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.449
Posición de publicación: 22
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.449
Posición de publicación: 2
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 108
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 31
- 575** 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. (Alemania): 2005. ISSN 1434-193X



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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.548

Posición de publicación: 16

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 55

- 576** Ballester, P.; Costa, A.; Castilla A.M.; Deyà, P.M.; Gomila R.M.; Frontera, A.; Hunter, C.A. DABCO! Directed Self! Assembly of Bisporphyrins (DABCO=1,4!Diazabicyclo[2.2.2]octane). 908895 - Chemistry-A European Journal. 11 - 7, pp. 2196 - 2206. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2005. ISSN 0947-6539

DOI: <https://doi.org/10.1002/chem.200400772>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152173>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.907

Posición de publicación: 8

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 125

- 577** Espinosa, A.; Frontera, A.; García, R.; Soler, M. A.; Tárraga, A. Electrophilic Behavior of 3-Methyl-2-methylthio-1,3,4-thiadiazolium Salts: A Multimodal Theoretical Approach. 912661 - Arkivoc. 2005 - Part(ix), pp. 415 - 437. (Estados Unidos de América): 2005. ISSN 1424-6376

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 0.694

Posición de publicación: 42

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 55

- 578** 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. (Estados Unidos de América): BioChem Press, 2005. ISSN 1538-6414

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

- 579** 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. (Estados Unidos de América): 2005. ISSN 1523-7060

DOI: <https://doi.org/10.1021/ol0474608>

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.368

Posición de publicación: 5

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 55



- 580** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Garau, C.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P. M.; Pichierri, F. Counterintuitive affinity of [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>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.438

Posición de publicación: 32

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.438

Posición de publicación: 8

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 111

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 31

- 581** 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. (Estados Unidos de América): 2005. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp044616c>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148287>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.898

Posición de publicación: 24

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.898

Posición de publicación: 6

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 111

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 31

- 582** P. Ballester; A. Costa; P. M. Deyà; A. Frontera; R. M. Gomila; J. K. M. Sanders; A. I. Oliva; C. A. Hunter. Self-assembly, Binding and Dynamic Properties of Heterodimeric Porphyrin Macrocycles. 900789 - Journal of Organic Chemistry. 70, pp. 6616 - 6622. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2005. ISSN 0022-3263

DOI: <https://doi.org/10.1021/jo0505369>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148288>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.675

Posición de publicación: 7

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 55

- 583** 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>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.438

Posición de publicación: 32

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.438

Posición de publicación: 8

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 111

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 31

- 584** 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. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2005. ISSN 0947-6539

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.907

Posición de publicación: 8

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 125

- 585** 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. (Estados Unidos de América): 2005. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp053380p>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148529>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.898

Posición de publicación: 24

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 111

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.898

Posición de publicación: 6

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 31

- 586** Garau, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, 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>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Tipo de soporte: Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.316**Posición de publicación:** 9**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 34

- 587** Rotger, M. C.; Piña, M. N.; Frontera, A.; Martorell, G.; Ballester, P.; Deyà, P. M.; Costa, A. Conformational Preferences and Self-Template Macrocyclization of Squaramide-Based Foldable Modules. 900789 - Journal of Organic Chemistry. 69 - 7, pp. 2302 - 2308. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2004. ISSN 0022-3263

DOI: <https://doi.org/10.1021/jo035546t>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148008>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.462**Posición de publicación:** 7**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, ORGANIC**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 58

- 588** Ballester Balaguer, Pablo José; Capó, Magdalena; Costa Torres, Antonio; Deyà Serra, Pere Maria; Frontera Beccaria, Antonio; Gomila Ribas, Rosa Maria. Self-assembly of [2]Rotaxane exploiting Reversible Pt(II)-Pyridine Coordinate Bonds. 910462 - Molecules. 9, pp. 278 - 286. (Suiza): MDPI, 2004. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.3390/90500278>>. ISSN 1420-3049

DOI: <https://doi.org/10.3390/90500278>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/1493>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 0.676**Posición de publicación:** 42**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, ORGANIC**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 58

- 589** Garau, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Ballester, P.; Costa, A. i Deyà, P.M. Cation- π versus anion- π 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>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.438**Posición de publicación:** 8**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 34

- 590** Garau, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P.M. Cation- π versus Anion- π Interactions: Energetic, Charge Transfer, and Aromatic Aspects. 909612 - Journal of Physical Chemistry A. 108 - 43, pp. 9423 - 9427. (Estados Unidos de América): 2004. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp047534x>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/152171>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.639**Posición de publicación:** 27**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 106

- 591** 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>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.438**Posición de publicación:** 8**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 34

- 592** 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. (Reino Unido): 2004. ISSN 0040-4039

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2004.10.112>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148009>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.484**Posición de publicación:** 15**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, ORGANIC**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 58

- 593** 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>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.316**Posición de publicación:** 9**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 34

- 594** Garau, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P. M. Anion-pi Interactions: Must the Aromatic Ring Be Electron Deficient?. 900672 - New Journal of Chemistry. 27, pp. 211 - 214. (Francia): 2003. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/b210110f>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147497>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.272**Posición de publicación:** 25**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 123

- 595** 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>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.438**Posición de publicación:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.438**Posición de publicación:** 15**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 33**Categoría:** PHYSICS, CONDENSED MATTER**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 87

- 596** Qian, X.; Xu, X.; Li, Z.; Frontera, A. Intramolecular Noncovalent Force in Cyclic Amidines: Nonbonded Interaction between Carbon Atoms and Heteroatoms. 903311 - Chemical Physics Letters. 372, pp. 489. (Holanda): 2003. ISSN 0009-2614

DOI: [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(03\)00395-6](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(03)00395-6)**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147902>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.438**Posición de publicación:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.438**Posición de publicación:** 15**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 33**Categoría:** PHYSICS, CONDENSED MATTER**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 87

- 597** 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. (Estados Unidos de América): 2003. ISSN 1523-7060

DOI: <https://doi.org/10.1021/ol034247n>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147986>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.092**Posición de publicación:** 5**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, ORGANIC**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 55



- 598** Garau, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Ballester, P.; Costa, A.; Deya, P. M. Dual binding mode of s-triazine to anions and cations. 910471 - Organic Letters. 5 - 13, pp. 2227 - 2229. (Estados Unidos de América): 2003. ISSN 1523-7060
DOI: <https://doi.org/10.1021/ol034650u>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147987>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.092
Posición de publicación: 5
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 55
- 599** 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>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.438
Posición de publicación: 7
Tipo de soporte: Revista
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 33
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.438
Posición de publicación: 15
Categoría: PHYSICS, CONDENSED MATTER
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 87
- 600** 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>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.438
Posición de publicación: 7
Tipo de soporte: Revista
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 33
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.438
Posición de publicación: 15
Categoría: PHYSICS, CONDENSED MATTER
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 87
- 601** 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. (Alemania): 2003. ISSN 1439-4235
DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.200300886>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147635>

**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.316**Posición de publicación:** 18**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.316**Posición de publicación:** 4**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.316**Posición de publicación:** 9**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 101**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 33**Categoría:** PHYSICS, CONDENSED MATTER**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 87

- 602** 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>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.526**Posición de publicación:** 7**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 31

- 603** Quiñonero, D.; Frontera, A.; Ballester, P.; Garau, C.; Costa, A.; Deyà, P.M. Quantification of aromaticity in oxocarbons: the problem of the fictitious nonaromatic reference system. 908895 - Chemistry-A European Journal. 8 - 2, pp. 433 - 438. (Alemania): Wiley-VHC Verlag GmbH & Co., 2002. ISSN 0947-6539

DOI: [https://doi.org/10.1002/1521-3765\(20020118\)8:2<433::AID-CHEM433>3.0.CO;2-T](https://doi.org/10.1002/1521-3765(20020118)8:2<433::AID-CHEM433>3.0.CO;2-T)**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/152166>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.238**Posición de publicación:** 9**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 119

- 604** Gomila R. M.; Quiñonero, D.; Rotger, C.; Garau, C.; Frontera, A.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P. M. 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 - 3, pp. 399 - 401. (Estados Unidos de América): 2002. ISSN 1523-7060

DOI: <https://doi.org/10.1021/ol0170962>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147496>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.715**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, ORGANIC**Revista dentro del 25%:** Si

**Posición de publicación:** 5**Num. revistas en cat.:** 53

- 605** Quiñonero, D.; Garau, C.; Frontera, A.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P.M. Counterintuitive Interactions of Anions with Benzene Derivatives. 903311 - Chemical Physics Letters. 359 - 5-6, pp. 486 - 492. (Holanda): 2002. ISSN 0009-2614

DOI: [https://doi.org/10.1016/S0009-2614\(02\)00709-1](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(02)00709-1)**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/152167>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Índice de impacto:** 2.526**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 7**Num. revistas en cat.:** 31

- 606** 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>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Índice de impacto:** 2.526**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 7**Num. revistas en cat.:** 31

- 607** Quiñonero, D.; Garau, C.; Rotger, C.; Frontera, A.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P.M. Anion-pi interactions: do they exist?. 900624 - Angewandte Chemie-International Edition. 41 - 18, pp. 3389 - 3392. (Alemania): 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>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 7.671**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 4**Num. revistas en cat.:** 119

- 608** 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. (Alemania): 2002. ISSN 1432-881X

DOI: <https://doi.org/10.1007/s00214-002-0373-7>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147552>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 8**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL



Índice de impacto: 1.421
Posición de publicación: 48

Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 95

- 609** 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. (Francia): 2001. ISSN 1144-0546

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.44

Posición de publicación: 19

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Sí

Num. revistas en cat.: 118

- 610** 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>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.364

Posición de publicación: 8

Tipo de soporte: Revista

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 30

- 611** 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>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.364

Posición de publicación: 8

Tipo de soporte: Revista

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 30

- 612** 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. (Alemania): 2000. ISSN 1432-881X

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

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

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.263

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Sí

Posición de publicación: 22**Num. revistas en cat.:** 91

- 613** 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. (Reino Unido): 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>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.558
Posición de publicación: 13
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 48
- 614** 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>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 7
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.364
Posición de publicación: 6
Tipo de soporte: Revista
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 30
- 615** Gomila, R. M.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Ballester, P.; Deyà, P. M. Ab initio calculations on Zinc Porphyrins Complexed to Amines. Geometrical Details and NMR Chemical Shifts. 907579 - Theochem-Journal of Molecular Structure. 531, pp. 381 - 386. (Holanda): 2000. ISSN 0166-1280
DOI: [https://doi.org/10.1016/S0166-1280\(00\)00456-5](https://doi.org/10.1016/S0166-1280(00)00456-5)
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147606>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Tipo de soporte: Revista
- 616** Jorgensen, W. L.; Damm, W.; Frontera, A.; Tirado-Rives, J. The OPLS All Atom Force Field for Carbohydrates. 900660 - Journal of Computational Chemistry. 18 - 16, pp. 1955. (Estados Unidos de América): 1997. ISSN 0192-8651
DOI: [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1096-987X\(199712\)18:163.3.CO;2-A](https://doi.org/10.1002/(SICI)1096-987X(199712)18:163.3.CO;2-A)
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.357
Posición de publicación: 8
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 111
- 617** Saá, J. M.; Martorell, G.; Frontera, A. On the mechanism of the lithiation of hydric aromatics: direct NMR evidence for short H-Li contacts in mixed aggregates. 900789 - Journal of Organic Chemistry. 61 - 16, pp. 5194. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 1996. ISSN 0022-3263
DOI: <https://doi.org/10.1021/jo960570a>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147907>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Tipo de soporte: Revista



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.722
Posición de publicación: 5

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 37

- 618** Jorgensen, W. L.; Damm, W.; Frontera, A.; Lamb, M. Molecular Recognition of Carbohydrates: Interaction of diols with acetate ion. 201130 - NATO ASI Series, Series C: Mathematical and Physical Sciences. 485, pp. 115 - 126. (Estados Unidos de América): 1996. ISSN 0258-2023

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

- 619** Morey Salvà, Jeroni; Frontera Beccaria, Antonio. Solid-State Redox Chemistry: Preparation of 1,4-Naphthoquinone, Hydroquinone, and the Corresponding Mixed Quinhydrone in the Solid State. 901126 - Journal of Chemical Education. 72 - 1, pp. 63. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, Division of Chemical Education, 1995. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1021/ed072p63>>. ISSN 0021-9584

DOI: <https://doi.org/10.1021/ed072p63>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/1769>

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

Nº total de autores: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 0.309
Posición de publicación: 78

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 106

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 0.309
Posición de publicación: 5

Categoría: EDUCATION, SCIENTIFIC DISCIPLINES
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 10

- 620** Saá, J.M.; Morey, J.; Frontera, A.; Deyà, P.M. Predicting Directed Lithiations by Means of MNDO-Determined Agostic Interaction Parameters and Proximity Features. Peri Lithiation of Polyhydric Phenolic Compounds. 900665 - Journal of the American Chemical Society. 117 - 3, pp. 1105 - 1116. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 1995. ISSN 0002-7863

DOI: <https://doi.org/10.1021/ja00108a029>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152162>

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.263
Posición de publicación: 6

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 106

- 621** Saá, J.M.; Deyà, P.M.; Suñer, G.; Frontera, A. Origin of the regioselective lithiation of 1,3-heteroatom disubstituted aromatics. MNDO evidence for bidentate complexation. 900665 - Journal of the American Chemical Society. 114 - 23, pp. 9093 - 9100. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 1992. ISSN 0002-7863

DOI: <https://doi.org/10.1021/ja00049a048>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152160>

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.298

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 5

Num. revistas en cat.: 103

- 622** Deyà, P.M.; Suñer, G.A.; Frontera, A. Doubly Group-Transfer Reactions: a Theoretical (AM1) Approach. 900789 - Journal of Organic Chemistry. 57 - 25, pp. 6731 - 6735. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 1992. ISSN 0022-3263
DOI: <https://doi.org/10.1021/jo00051a012>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152161>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 3
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.029
Posición de publicación: 3
Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 32
- 623** Saá, J. M.; Morey, J.; Suñer, G.; Frontera, A.; Costa, A. The Generation of C,O,O-Trilithiated Derivatives of Dihydric Phenols. 900807 - Tetrahedron Letters. 32 - 49, pp. 7313 - 7316. (Reino Unido): 1991. ISSN 0040-4039
DOI: [https://doi.org/10.1016/0040-4039\(91\)80507-3](https://doi.org/10.1016/0040-4039(91)80507-3)
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.074
Posición de publicación: 6
Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 33
- 624** Quinonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M. Anion- π interactions in molecular recognition. Anion Coordination Chemistry. pp. 321 - 361. Weinheim(Alemania): Wiley-Vch, 2012. ISBN 978-3-527-32370-8
Tipo de producción: Capítulo de libro
Tipo de soporte: Libro
Nº total de autores: 3
- 625** Garau, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P.M. Anion- π interactions. Recent Research Development Chemical Physics. 5, pp. 227 - 255. Kerala(India): 2004. ISBN 81-7895-155-X
Tipo de producción: Capítulo de libro
Tipo de soporte: Libro
- 626** Bauza, A.; Seth, S. K.; Frontera, A. Tetrel bonding interactions at work: Impact on tin and lead coordination compounds. 900750 - Coordination Chemistry Reviews. 384, pp. 107 - 125. (Holanda): 2019. ISSN 0010-8545
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2019.01.003>
Tipo de producción: Review
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 15.367
Posición de publicación: 1
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 45
- 627** Bauza, A.; Mooibroek, T. J.; Frontera, A. Towards design strategies for anion π interactions in crystal engineering. 912697 - Crystengcomm. 18, pp. 10 - 23. (Reino Unido): 2016. ISSN 1466-8033
DOI: <https://doi.org/10.1039/C5CE01813G>
Tipo de producción: Review
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.474
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 49**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.474**Posición de publicación:** 5**Num. revistas en cat.:** 166**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 26

- 628** Taleghani, S.; Mirzaei, M.; Eshtiagh-Hosseini, H.; Frontera A. Tuning the topology of hybrid inorganic organic materials based on the study of flexible ligands and negative charge of polyoxometalates: A crystal engineering perspective. 900750 - Coordination Chemistry Reviews. 309, pp. 84 - 106. (Holanda): 2016. ISSN 0010-8545

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2015.10.004>**Tipo de producción:** Review**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 13.324**Posición de publicación:** 1**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 46

- 629** Bauza, A.; T. J. Mooibroek, Frontera, A. Tetrel bonding interactions. 912682 - Chemical Record. 16, pp. 473 - 487. (Estados Unidos de América): 2016. ISSN 1527-8999

DOI: <https://doi.org/10.1002/tcr.201500256>**Tipo de producción:** Review**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.855**Posición de publicación:** 45**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 166

- 630** Bauza, A.; Mooibroek, T. J.; Frontera, A. The bright future of unconventional s/p-hole interactions. 910825 - Chemphyschem. (Alemania): 2015. ISSN 1439-4235

DOI: <https://doi.org/10.1002/cphc.201500314>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147500>**Tipo de producción:** Review**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.138**Posición de publicación:** 50**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 144**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.138**Posición de publicación:** 8**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 35

- 631** Mahmoudi, G.; Bauza, A.; Rodriguez-Dieguez, A.; Garczarek, P.; Kaminsky, W.; Frontera, A. Synthesis, X-ray Characterization, DFT Calculations and Hirshfeld Surface Analysis Studies of carbonylhydrazone based on Zn(II) complexes. 912697 - Crystengcomm. 18, pp. 102 - 112. (Reino Unido): 2015. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C5CE01915J>**Tipo de producción:** Review**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.849**Posición de publicación:** 38**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 163



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.849
Posición de publicación: 5

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 26

- 632** Mirzaei, M.; Eshtiagh-Hosseini, H.; Alipour, M.; Frontera A. Recent developments in the crystal engineering of diverse coordination modes (0 12) for Keggin-type polyoxometalates in hybrid inorganic-organic architectures. 900750 - Coordination Chemistry Reviews. 275, pp. 1 - 18. (Holanda): 2014. ISSN 0010-8545

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2014.03.012>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/147681>

Tipo de producción: Review

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 12.239

Posición de publicación: 1

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 45

- 633** Fiol, J.J.; Barceló-Oliver, M.; Tasada, A.; Frontera, A.; Terrón, A.; García-Raso, A. Structural characterization, recognition patterns and theoretical calculations of long-chain N-alkyl substituted purine and pyrimidine bases as ligands: on the importance of anion- π interactions. 900750 - Coordination Chemistry Reviews. 257 - 19-20, pp. 2705 - 2715. (Holanda): 2013. ISSN 0010-8545

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2012.12.013>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152223>

Tipo de producción: Review

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 12.098

Posición de publicación: 1

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 44

- 634** Frontera, A. Encapsulation of anions: Macrocyclic receptors based on metal coordination and anion- π interactions. 900750 - Coordination Chemistry Reviews. 257, pp. 1716 - 1727. (Holanda): 2013. ISSN 0010-8545

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2013.01.032>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148011>

Tipo de producción: Review

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 12.098

Posición de publicación: 1

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 44

- 635** Frontera, A.; Gamez, P.; Mascal, M.; Mooibroek, T.J.; Reedijk, J. Putting Anion- π Interactions Into Perspective. 900624 - Angewandte Chemie-International Edition. 50 - 41, pp. 9564 - 9583. (Alemania): 2011. ISSN 1433-7851

DOI: <https://doi.org/10.1002/anie.201100208>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/152216>

Tipo de producción: Review

Posición de firma: 1

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 13.46

Posición de publicación: 7

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 151



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

Tipo de producción: Review

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 6

Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **Título del trabajo:** Fine tuning of the anion- π interaction
Nombre del congreso: International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry, ISMSC-7
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Dunedin, New Zealand, Nueva Zelanda
Fecha de celebración: 2012
Fecha de finalización: 2012
Deyà, P. M.; Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Frontera, A.
- 2** **Título del trabajo:** Theoretical ab initio study of anion- π interactions in inorganic rings
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Barcelona, España
Fecha de celebración: 2012
Fecha de finalización: 2012
Bauzá, A.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà P. M.
- 3** **Título del trabajo:** Complexes of Zinc(II) with N-Imidazolyl and N-Pyrazolyl Pyrimidine donor ligands: Synthesis, crystal structures and theoretical study
Nombre del congreso: International conference on coordination chemistry (ICCC40)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Valencia, España
Fecha de celebración: 2012
Fecha de finalización: 2012
Frontera, A.; Bauzá, A.; Deyà, P. M.
- 4** **Título del trabajo:** Structural Investigation of Anion-Triazole Interactions: A theoretical approach
Nombre del congreso: International conference on coordination chemistry (ICCC40)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Valencia, España
Fecha de celebración: 2012
Fecha de finalización: 2012
Bauzá, A.; Frontera, A.; Deyà, P. M.
- 5** **Título del trabajo:** Experimental and theoretical study of thymine and cytosine derivatives: the crucial role of weak noncovalent interactions
Nombre del congreso: 11th European Biological Inorganic Chemistry Conference (Eurobic11)



Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Granada, España

Fecha de celebración: 2012

Fecha de finalización: 2012

Entidad organizadora: 4027 - Universidad de Granada

Tipo de entidad: Universidad

Barceló-Oliver, M.; Baquero, B.A.; Bauzá, A.; García-Raso, A.; Terrón, A.; Frontera, A.; Mata, I.; Molins, E. "libro de actas del congreso; P-203; página 339".

- 6 Título del trabajo:** Coordination Chemistry of modified purine and pyridine bases: Structural Characterization.

Nombre del congreso: European Biological Inorganic Chemistry Conference

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Granada, España

Fecha de celebración: 2012

Fecha de finalización: 2012

Fiol, J.J.; García-Raso, A.; Deyà, P.M.; Frontera, A.; Tasada, A.; Torres, M.; Cañellas, P.; Estarellas, C.; Sánchez, K.; Cánaves, M.M.; Cabra, M.I.; Mata, I.; Molins, E. "Book of Abstracts Pg. 54".

- 7 Título del trabajo:** Interplay between ion-pi and van der Waals Argon-pi interactions

Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Barcelona, España

Fecha de celebración: 2012

Fecha de finalización: 2012

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

- 8 Título del trabajo:** Understanding the origin of the RNA-U1A human protein binding: A theoretical approach

Nombre del congreso: X Girona Seminar on theoretical and Computational Chemistry for the Modeling of Biochemical Systems: From Theory to Applications

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Girona, España

Fecha de celebración: 2012

Fecha de finalización: 2012

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

- 9 Título del trabajo:** Interplay Feasibility of Single-Walled Carbon Nanotubes as Materials for CO₂ Adsorption: A DFT Study between ion-pi and van der Waals Argon-pi interactions

Nombre del congreso: 9th Spanish-Italian Symposium on Organic Chemistry

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Tenerife, España

Fecha de celebración: 2012

Fecha de finalización: 2012

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



- 10** **Título del trabajo:** On the direccionality of anion-pi interactions
Nombre del congreso: WORLD ASSOCIATION OF THEORETICAL ORIENTED CHEMISTS
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 2011
Fecha de finalización: 2011
Frontera, A.; Estarellas, C.; Bauzá, A.; Quiñonero, D.; Deyà P. M.
- 11** **Título del trabajo:** Experimental and theoretical study of uracil derivatives: the crucial role of weak pi-pi, lone pair-pi and fluorine-fluorine noncovalent interactions.
Nombre del congreso: 3rd EuCheMS Chemistry Congress
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Nuremberg, Alemania
Fecha de celebración: 2010
Fecha de finalización: 2010
Estarellas, C.; Frontera, A.; Barcelo-Oliver, M.; García-Raso, A.; Terron, A.; Mata, I.; Molins, E."Book of Abstracts, pág. 47".
- 12** **Título del trabajo:** On the energetics and geometry of relevant interactions in biological systems:Ri-MP2, SCS-Ri-MP2 and CCSD(T) calculations.
Nombre del congreso: 3rd EuCheMS Chemistry Congress
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Nuremberg, Alemania
Fecha de celebración: 2010
Fecha de finalización: 2010
Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M."Book of Abstracts, pág. 48".
- 13** **Título del trabajo:** Supramolecular assmby of Mg(II) Complexes directed by Associative Lone pair-pi/pi-pi/pi-anion-pi/pi-Lone pair Interactions
Nombre del congreso: 7th Congress on Electronic Structure:Principles and Applications (ESPA 2010)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Oviedo, España
Fecha de celebración: 2010
Fecha de finalización: 2010
Estarellas, C.; Frontera, A.; Das, A.; Choudhury, S.R.; Dey, B.; Yalamanchili, S.K.; Helliwell, M.; Gamez, P.; Mukhopadhyay, S."Book of abstracts, pag. 106".
- 14** **Título del trabajo:** A combined experimental and theoretical study of anion-pi interactions in N6- and N9-decyl-adenine salts.
Nombre del congreso: 7th Congress on Electronic Structure:Principles and Applications (ESPA 2010)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Oviedo, España
Fecha de celebración: 2010
Fecha de finalización: 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".

15 Título del trabajo: Single-Walled Carbon Nanotubes as Materials for Adsorption and Storage of CO₂: A DFT Study

Nombre del congreso: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2010)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Oviedo, España

Fecha de celebración: 2010

Fecha de finalización: 2010

Frontera, A.; Estarellas, C.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "Book of abstracts, pag. 141".

16 Título del trabajo: DFT Study of CO₂ adsorption on single and multi-walled carbon nanotubes

Nombre del congreso: Gas separation and gas storage using porous materials

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Lausanne, Suiza

Fecha de celebración: 2010

Fecha de finalización: 2010

Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "Book of abstracts, pag. 20".

17 Título del trabajo: DFT Study of H₂ adsorption on single and multi-walled carbon nanotubes

Nombre del congreso: Gas separation and gas storage using porous materials

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Lausanne, Suiza

Fecha de celebración: 2010

Fecha de finalización: 2010

Frontera, A.; Estarellas, C.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "Book of abstracts, pag. 19".

18 Título del trabajo: Interaccions anió-pi en sistemes biològics

Nombre del congreso: VI Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Nacional

Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

Ciudad de celebración: Valencia, España

Fecha de celebración: 2010

Fecha de finalización: 2010

Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "Pàgina 30, llibre de resums".

19 Título del trabajo: Experimental and theoretical study of uracil derivatives: the crucial role of weak pi-pi, lone pair-pi and fluorine-fluorine noncovalent interactions

Nombre del congreso: 3rd EuCheMS Chemistry Congress

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Nuremberg, Alemania

Fecha de celebración: 2010

Fecha de finalización: 2010

Estarellas, C.; Frontera, A.; Barceló-Oliver, M.; Garcia-Raso, A.; Terron, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "Reference code: 5576_0716".

20 Título del trabajo: Anion-pi interactions in biological systems

Nombre del congreso: 4th International Symposium on macrocyclic and supramolecular chemistry

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Maastricht, Holanda

Fecha de celebración: 2009

Fecha de finalización: 2009

Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "Page 138, book of abstracts".

21 Título del trabajo: Anion- π Interactions in four membered rings

Nombre del congreso: 4th International Symposium on Macrocyclic and Supramolecular Chemistry

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Maastricht, Holanda

Fecha de celebración: 2009

Fecha de finalización: 2009

Rotger, C.; Estarellas, C.; Soberats, B.; Quiñonero, D.; Capo, M.; Frontera, A.; Costa, A.; Deyà, P.M.

22 Título del trabajo: Theoretical ab initio study of the interplay between hydrogen bonding, cation- π and π - π interactions.

Nombre del congreso: Reunión científica bioinorgánica 2009

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Puigderros, España

Fecha de celebración: 2009

Fecha de finalización: 2009

Estarellas, C.; Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M. "P27, libro de comunicaciones".

23 Título del trabajo: Synthesis, crystal structure and theoretical studies of N¹-substituted-5-X-uracil (X = F, H) ligands

Nombre del congreso: Reunión Científica Bioinorgánica 2009 (15-18 Julio).

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Puigderros (Llucmajor-Mallorca), España

Fecha de celebración: 2009

Fecha de finalización: 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".

24 Título del trabajo: Anion- π Interactions in four membered rings

Nombre del congreso: Reunión Científica de Bioinorgánica

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España

Fecha de celebración: 2009

Fecha de finalización: 2009

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

25 Título del trabajo: Anion- π Interactions in Riboflavin Systems

Nombre del congreso: 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

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster



Ciudad de celebración: Barcelona, España

Fecha de celebración: 2009

Fecha de finalización: 2009

Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M."Book of abstracts, poster 33".

- 26 Título del trabajo:** Cooperativity effects between Noncovalent Interactions: They are Key for Z-DNA Stability.

Nombre del congreso: 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

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Barcelona, España

Fecha de celebración: 2009

Fecha de finalización: 2009

Frontera, A.; Estarellas, C.; Escudero, D.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M."Book of abstracts, poster 36".

- 27 Título del trabajo:** Is the Ethynyl Group an Electron-Withdrawing Substituent?

Nombre del congreso: 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

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Barcelona, España

Fecha de celebración: 2009

Fecha de finalización: 2009

Lucas, X.; Estarellas, C.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M."Book of abstracts, poster 50".

- 28 Título del trabajo:** Very Long Range Effects: Cooperativity between Anion- π and Hydrogen Bonding Interactions.

Nombre del congreso: 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

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Barcelona, España

Fecha de celebración: 2009

Fecha de finalización: 2009

Lucas, X.; Estarellas, C.; Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M."Book of abstracts, poster 32".

- 29 Título del trabajo:** Theoretical study of the pyrrole dimer: towards a fully agreement with the experiments results.

Nombre del congreso: 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

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Barcelona, España

Fecha de celebración: 2009

Fecha de finalización: 2009

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

- 30** **Título del trabajo:** Study of interaction in 1,5,8,12-tetrakis(2-pyrimidil)1,5,8,12-dodecane and its Ag(I) complexes
Nombre del congreso: 4th EuCheMS Conference on NITROGEN LIGANDS in Coordination Chemistry, Metal-Organic Chemistry, Bioinorganic Chemistry & Homogeneous Catalysis
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Garmisch-Partenkirchen, Alemania
Fecha de celebración: 2008
Fecha de finalización: 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."
- 31** **Título del trabajo:** MP2 study of edge-to-face aromatic interactions between pyridine moieties and benzene.
Nombre del congreso: 6th Congres on electronic structure: principles and applications (ESPA 2008)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 2008
Fecha de finalización: 2008
Escudero, D.; Frontera, A.; Estarellas, C.; Quiñonero, D.; Deyà, P.M."Book of Abstracts, Pág. 106".
- 32** **Título del trabajo:** Interplay between edge-to-face aromatic interactions and hydrogen bonding interactions
Nombre del congreso: 6th Congres on electronic structure: principles and applications (ASPA 2008)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 2008
Fecha de finalización: 2008
Frontera, A.; Quiñonero, D.; Escudero, D.; Deyà, P.M."Book of Abstracts, Pág. 109".
- 33** **Título del trabajo:** MP2 Study of the Dual sigma/pi Anion Binding Affinity of Fluorinated Phthalic Acid Anhydrides
Nombre del congreso: Electronic and Structure: Principles and Applications (ESPA)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 2008
Fecha de finalización: 2008
Estarellas, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Morey, J.; Deyà, P.M."Book of Abstracts, P55, pagina 107".
- 34** **Título del trabajo:** A Novel Anion-pi Interaction in Biological Systems: Interplay Between Anion-pi and C-H/pi Interactions
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2008)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 2008
Fecha de finalización: 2008
Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M."Book of Abstracts, OP7, pagina 39".



- 35** **Título del trabajo:** Efectes sinèrgics entre interaccions anió-pi i d'enllaç d'hidrogen
Nombre del congreso: V Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Nacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Vic (España), España
Fecha de celebración: 2008
Fecha de finalización: 2008
Escudero, D.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P. M."Book of Abstracts, Pág. 37".
- 36** **Título del trabajo:** Mapas de Energía de Polarización Inducida (IPE): Una Nueva Herramienta para Predecir Geometrías de Complejos Anión- π
Nombre del congreso: XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Nacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Toledo, España
Fecha de celebración: 2007
Fecha de finalización: 2007
Escudero, D.; Frontera, A.; Quiñonero, D.; Deyà, P. M."Book of Abstracts Tomo II, Pág. 397".
- 37** **Título del trabajo:** Estudio Teórico de Sinergias en Enlaces de Hidrógeno no Convencionales en Complejos con Sistemas Aromáticos
Nombre del congreso: XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Nacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Toledo, España
Fecha de celebración: 2007
Fecha de finalización: 2007
Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P. M."Book of Abstracts Tomo I, Pág. 121".
- 38** **Título del trabajo:** Strong Substituent Effects in [n.n]Paracyclophane Complexes with Cations
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA 2006)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 2006
Fecha de finalización: 2006
Frontera, A.; Quiñonero, D.; Garau, C. i Deyà, P.M."Book of Abstracts Pag. 116".
- 39** **Título del trabajo:** Estudio teórico y cristalográfico de efectos sinérgicos entre interacciones catión- π , anión- π y π - π
Nombre del congreso: III Reunión de Química Orgánica del Mediterráneo (REQOMED3)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Nacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Castellón, España
Fecha de celebración: 2006
Fecha de finalización: 2006
Frontera, A.; Quiñonero, D.; Garau, C. i Deyà, P.M."Book of Abstracts p. C18".



- 40** **Título del trabajo:** Interplay between catión-pi, anión-pi and pi-pi interactions
Nombre del congreso: III simposium de Investigadores Jóvenes RSEQ-SIGMA-ALDRICH
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Tarragona, España
Fecha de celebración: 2006
Fecha de finalización: 2006
Quiñonero, D.; Frontera A.; Garau, C. i Deyà, P.M."Book of Abstracts Pag. 42".
- 41** **Título del trabajo:** Modelització i Síntesi de Macrocicles per al reconeixament Quiral de Pèptids
Nombre del congreso: IV Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Nacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Lleida, España
Fecha de celebración: 2006
Fecha de finalización: 2006
Ballester, P.; Castilla, A.M.; Costa, A.; Deyà, P.M.; Quiñonero, D. i Frontera, A."Llibre de resums pag. 73".
- 42** **Título del trabajo:** Synergic effects between cation-pi, anion-pi and pi-pi interactions.
Nombre del congreso: Structure: Principles and Applications (ESPA 2006)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 2006
Fecha de finalización: 2006
David Quiñonero; * Antonio Frontera; Carolina Garau; Pere M. Deyà."Book of Abstracts P-39".
- 43** **Título del trabajo:** Cation induced face-to-face stacking interactions in benzene-benzene systems
Nombre del congreso: 7th World congress of theoretically oriented chemists (WATOC'05)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Ciudad del Cabo, República Sudafricana
Fecha de celebración: 2005
Fecha de finalización: 2005
C. Garau; A. Frontera; D. Quiñonero; P. M. Deyà. "Book of abstracts, p. 165".
- 44** **Título del trabajo:** Exploring new binding units for the molecular recognition of anions
Nombre del congreso: European Science Fundation Research Conference on Supramolecular Chemistry: Molecular Architectures and Systems
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Obernai (Strasbourg), Francia
Fecha de celebración: 2005
Fecha de finalización: 2005
D. Quiñonero; C. Garau; A. Frontera; P. Ballester; A. Costa; P. M. Deyà. "Posters number 28 and 37".
- 45** **Título del trabajo:** On the reliability of MPWB1K exchange-correlation functional to describe the anion-pi interactions
Nombre del congreso: XXXI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Quitel 2005
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster



Ciudad de celebración: Isla Margarita. Venezuela., Venezuela

Fecha de celebración: 2005

Fecha de finalización: 2005

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

46 Título del trabajo: DABCO Directed Self-Assembly of Zn bis-Porphyrins: 1:1 Complexes and 2:2 Molecular Assemblies

Nombre del congreso: 227th American Chemical Society National Meeting

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

Ciudad de celebración: Anaheim, Estados Unidos de América

Fecha de celebración: 2004

Fecha de finalización: 2004

Ballester, P.; Costa, A.; Deyà, P. M.; Frontera, A.; Gomila, R. R.; Hunter, C. A."Book of abstracts".

47 Título del trabajo: Estudi teòric de la naturalesa física de les interaccions anió-pi

Nombre del congreso: III Trobada de joves investigadors dels països catalans

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

Ciudad de celebración: Tarragona, España

Fecha de celebración: 2004

Fecha de finalización: 2004

Garau, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P.M."Book of Abstracts, p. 39".

48 Título del trabajo: Síntesis de macrociclos para el reconocimiento quiral de péptidos

Nombre del congreso: II Reunión de Química Orgánica del Mediterráneo (REQOMED2)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Nacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Almería, España

Fecha de celebración: 2004

Fecha de finalización: 2004

Ballester, P.; Castilla, A. M.; Costa, A.; Deyà, P. M.; Frontera, A."Libro de resúmenes, p. P-19".

49 Título del trabajo: Ensamblaje de Zinc-porfirinas inducido por coordinación con aminas

Nombre del congreso: II Reunión de Química Orgánica del Mediterráneo (REQOMED2)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Nacional

Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

Ciudad de celebración: Almería, España

Fecha de celebración: 2004

Fecha de finalización: 2004

Ballester, P.; Capó, M.; Castilla, A. M.; Costa, A.; Deyà, P. M.; Frontera, A.; Gomila, R. M.; Hunter, C. A."Libro de resúmenes, p. C-11".

50 Título del trabajo: Unexpected binding affinity of [2.2]paracyclophane to cations

Nombre del congreso: Internet Electronic Conference of Molecular Design 2004

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

Ciudad de celebración: Galveston (Texas), Estados Unidos de América

Fecha de celebración: 2004

Fecha de finalización: 2004



A. Frontera; C. Garau; D. Quiñonero; P. Ballester; A. Costa; P. M. Deyà. "Internet Electronic Journal of Molecular Design, 2005, 4, 264-269".

- 51 Título del trabajo:** Síntesis de un macrociclo para el reconocimiento quiral de péptidos
Nombre del congreso: XX Reunión bienal de Química Orgánica
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Nacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Zaragoza, España
Fecha de celebración: 2004
Fecha de finalización: 2004
Ballester, P.; Castilla, A.M.; Costa, A.; Deyà, P.M.; Frontera, A. "Libro de resúmenes, p. O-27".
- 52 Título del trabajo:** Lithium Diffusion in Single Walled Carbon Nanotubes
Nombre del congreso: EUREGIONALE 2003
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Dresden, Alemania
Fecha de celebración: 2003
Fecha de finalización: 2003
Garau, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P. M. "Book of abstracts p. 87".
- 53 Título del trabajo:** Anion- π interactions
Nombre del congreso: 6th Word Congress of Theoretically Oriented Chemists. WATOC 02.
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Lugano, Suiza
Fecha de celebración: 2002
Fecha de finalización: 2002
Garau, C.; Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P. M. "Book of abstracts PB268".
- 54 Título del trabajo:** Existeixen les interaccions anió- π ?
Nombre del congreso: Segona trobada de joves investigadors dels Països Catalans
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Nacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Girona, España
Fecha de celebración: 2002
Fecha de finalización: 2002
D. Quiñonero; A. Frontera; C. Garau; P. M. Deyà. "Llibre de resums, p.42".
- 55 Título del trabajo:** Interaccions no intuïtives entre anions i derivats benzènics
Nombre del congreso: XVIII Reunió de la Xarxa de Química Teòrica i Computacional.
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Nacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Barcelona, España
Fecha de celebración: 2002
Fecha de finalización: 2002
Quiñonero, D.; Frontera, A.; Garau, C.; Deyà, P. M. "Libro de resúmenes p. 17.".
- 56 Título del trabajo:** Estudi teòric d'aromaticitat en l'esquaramida i àcids oxocarbònics
Nombre del congreso: Primera trobada de joves investigadors dels països catalans
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Nacional



Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

Ciudad de celebración: Sitges, España

Fecha de celebración: 2000

Fecha de finalización: 2000

Deyà, P. M.; Frontera, A.; Quiñonero, D."pp: 41".

- 57** **Título del trabajo:** A theoretical computation of aromaticity in squaramide
Nombre del congreso: 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists WATOC
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: London, Reino Unido
Fecha de celebración: 1999
Fecha de finalización: 1999
Quiñonero, D.; Frontera, A.; Deyà, P. M."pp: 395".
- 58** **Título del trabajo:** Molecular Recognition of Carbohydrates: Interaction of Diols with Acetate
Nombre del congreso: NATO Advanced Research Workshop
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Miami, Estados Unidos de América
Fecha de celebración: 1996
Fecha de finalización: 1996
Jorgensen, W. L.; Damm, W.; Frontera, A.; Lamb, M. L."Book of abstracts, p.115".
- 59** **Título del trabajo:** The Regioselective Lithiation of 1,3-Dimethoxybenzene. Theoretical Evidence of a Doubly Chelated Intermediate.
Nombre del congreso: 3rd European Symposium on Organic Reactivity ESSOR III
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Goteborg, Suecia
Fecha de celebración: 1991
Fecha de finalización: 1991
Suñer, G. A.; Frontera, A.; Deyà, P. M.; Saá, J. M.

Trabajos presentados en jornadas, seminarios, talleres de trabajo y/o cursos nacionales o internacionales

- 1** **Título del trabajo:** The bright future of tetrel, pnictogen and chalcogen bonding interactions
Nombre del evento: International Workshop: Interactions involving group 14-16 elements as electrophilic sites
Intervención por: Ponente
Ciudad de celebración: Milano, Italia
Fecha de celebración: 06/02/2017
Fecha de finalización: 06/02/2017
- 2** **Título del trabajo:** interacciones anion- π : naturaleza física y su importancia en sistemas biológicos
Nombre del evento: Seminarios del Departamento de Química Orgánica de la Universidad de Barcelona
Tipo de evento: Seminario
Intervención por: Ponente
Ciudad de celebración: Barcelona, España



Fecha de celebración: 28/03/2014

Fecha de finalización: 28/03/2014

- 3 Título del trabajo:** Ab initio/DFT calculations applied to the study of anion- π interactions and ring strain energies of closed- and open-shell small rings
Nombre del evento: SFB813 Chemie an Spinzentren
Intervención por: Ponente
Ciudad de celebración: BONN, Alemania
Fecha de celebración: 18/11/2013
Fecha de finalización: 18/11/2013
- 4 Título del trabajo:** Efectos de Cooperatividad entre Interacciones No-Covalentes en Sistemas Aromáticos
Nombre del evento: CICLO DE CONFERENCIAS DEL INSTITUTO DE QUÍMICA ORGÁNICA GENERAL (CSIC)
Intervención por: Ponente
Ciudad de celebración: MADRID, España
Fecha de celebración: 11/06/2008
Fecha de finalización: 11/06/2008

Gestión de I+D+i y participación en comités científicos

Comités científicos, técnicos y/o asesores

- 1 Título del comité:** Comisión Académica de Postgrado del Máster en Ciència i Tecnologia Química
Entidad de afiliación: UIB - Universitat de les Illes Balears
Fecha de inicio-fin: 2010 - 2010
- 2 Título del comité:** Comisión Académica de Postgrado del Máster en Ciència i Tecnologia Química
Entidad de afiliación: UIB - Universitat de les Illes Balears
Fecha de inicio-fin: 2010 - 2010
- 3 Título del comité:** Comisión Académica de Postgrado del Máster en Ciència i Tecnologia Química
Entidad de afiliación: UIB - Universitat de les Illes Balears
Fecha de inicio-fin: 2009 - 2009
- 4 Título del comité:** Comisión Académica de Postgrado del Máster en Ciència i Tecnologia Química
Entidad de afiliación: UIB - Universitat de les Illes Balears
Fecha de inicio-fin: 2008 - 2008

Organización de actividades de I+D+i

Título de la actividad: VIII Reunión de Química Orgánica del Mediterráneo

Tipo de actividad: Organización del congreso internacional Mediterranean Organic Chemistry Meeting

Fecha de inicio: 2016

Otros méritos

Estancias en centros de I+D+i públicos o privados

- Entidad de realización:** Universidad de Bonn
Ciudad entidad realización: Bonn, Alemania
Fecha de inicio: 2013 **Duración:** 12 días
Objetivos de la estancia: Invitado/a
Tareas contrastables: Investigación en sistemas biradicaloides
- Entidad de realización:** Yale University, Department of Chemistry
Ciudad entidad realización: New Haven, Estados Unidos de América
Fecha de inicio: 1995 **Duración:** 2 años
Objetivos de la estancia: Postdoctoral
Tareas contrastables: A new approach to the theoretical solvation (SCRF) model. Application to the study of biological models on ion transfer process

Resumen de otros méritos

- Descripción del mérito:** Líneas de investigación: Aplicabilidad de nanotubos de pared sencilla en el campo de las baterías de litio recargables; 01/11/2004 --
Entidad acreditante: Departamento de Química de la Universidad de las Islas Baleares
Fecha de concesión: 01/11/2004
- Descripción del mérito:** Líneas de investigación: Química supramolecular: estudio teórico mediante métodos computacionales de procesos de reconocimiento molecular.; 01/01/1997 -- 31/10/2003
Entidad acreditante: Departamento de Química de la Universidad de las Islas Baleares
Fecha de concesión: 01/01/1997
- Descripción del mérito:** Líneas de investigación: Parametrización de azúcares para el force field OPLS; 01/01/1995 -- 31/12/1996
Entidad acreditante: Departamento de Química de la Universidad de Yale (USA)
Fecha de concesión: 01/01/1995
- Descripción del mérito:** Líneas de investigación: Síntesis mediante polianiones aromáticos; 01/01/1990 -- 31/12/1994
Entidad acreditante: Departamento de Química de la Universidad de las Islas Baleares
Fecha de concesión: 01/01/1990
- Descripción del mérito:** Grandes Equipos que utiliza o ha utilizado: CG/EM Hewlett Packard 5930A; Responsable ; 1988 -- 1995
- Descripción del mérito:** Grandes Equipos que utiliza o ha utilizado: RMN Varian FT-80A y Bruker AMX-300; Usuario Asiduo ; 1988 -- 1995



- 7 Descripción del mérito:** Grandes Equipos que utiliza o ha utilizado: Local Area Vax Cluster (VX9000-VX8820, Digital); Usuario Asiduo ; 1990 -- 1995
- 8 Descripción del mérito:** Grandes Equipos que utiliza o ha utilizado: Cluster Silicon Graphics R/10000; Usuario Asiduo ; 1992 -- 1993
- 9 Descripción del mérito:** Grandes Equipos que utiliza o ha utilizado: Silicon Graphics (Personal Iris AD/35) WorkStation; Usuario Asiduo ; 1992 -- 1995
- 10 Descripción del mérito:** Grandes Equipos que utiliza o ha utilizado: Alpha DEC 3000/700 Workstation; Usuario Asiduo ; 1994 -- 1995
- 11 Descripción del mérito:** ASISTENCIA A CURSOS INTERNACIONALES - Gaussian: Theoretical and Practice. Amsterdam. 1993. - The 1996 Leo H. Sternbach Lectures. Elias J. Corey Catalytic Enantioselective Methods for the Synthesis of Complex Molecules. Molecular Details of the Cyclization Step in Sterol Biosynthesis. Yale University, USA. 1996. - 24th Peter A. Leermakers Symposium. Frontiers of Theoretical Chemistry: A tribute to John. A. Pople. Wesleyan University, USA. 1996. - Gordon Research Conferences, Frontiers of Science. University of Rhode Island, USA. Julio, 1996.

- 12 Descripción del mérito:** He formado parte como profesor de dos programas de doctorado que han obtenido la mención de calidad: 1) Programa doctorado: Química Universidad coordinadora: Islas Baleares Referencia: 2004-00161 2) Programa de doctorado: Química orgánica en la industria químico-farmacéutica. Universidad coordinadora: Valencia. Referencia: 2004-00414