



## **Emilio Cocinero Perez**

Generado desde: Editor CVN de FECYT

Fecha del documento: 21/01/2020

**v 1.4.0**

00c888ce9b068d4e5241150ac2216458

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/>

## Emilio Cocinero Perez

Apellidos: **Cocinero Perez**  
Nombre: **Emilio**  
ORCID: **0000-0001-7632-3728**  
ScopusID: **6506186443**  
Fecha de nacimiento: **27/03/1978**  
Sexo: **Hombre**  
Nacionalidad: **España**  
País de nacimiento: **España**  
Provincia de contacto: **Vizcaya**  
Ciudad de nacimiento: **Valladolid**  
Dirección de contacto: **Universidad del País Vasco. Facultad de Ciencia y Tecnología**  
Resto de dirección contacto: **Departamento de Química Física. Barrio de Sarriena s/n**  
Código postal: **48940**  
País de contacto: **España**  
C. Autón./Reg. de contacto: **País Vasco**  
Ciudad de contacto: **Leioa**  
Correo electrónico: **emiliojose.cocinero@ehu.es**  
Página web personal: **<http://grupodeespectroscopia.es/MW/>**

### Situación profesional actual

**Entidad empleadora:** Universidad del País Vasco  
**Departamento:** Departamento de Química Física, Facultad de Ciencia y Tecnología  
**Categoría profesional:** Investigador Doctor Permanente  
**Fecha de inicio:** 27/07/2016  
**Modalidad de contrato:** Contrato laboral indefinido

### Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
1	Universidad del País Vasco	Ramón y Cajal	01/01/2011
2	Universidad del País Vasco	Contrato Juan de la Cierva	01/01/2009
3	Physical and Theoretical Chemistry Lab., Oxford University	Research Fellowship (Department Staff)	01/06/2008
4	Physical and Theoretical Chemistry Lab., Oxford University	MEC postdoctoral contract	01/06/2006
5	Universidad de Valladolid	Contrato de titulado superior de investigación	01/05/2006
6	Universidad de Valladolid	Becario FPU	01/01/2003
7	Universidad de Valladolid	Becario UVA-Caja Duero	01/05/2002
8	Universidad de Valladolid	Becario Fundación Ramón Areces	01/11/2001
9	Universidad de Valladolid	Becario de colaboración	01/12/2000



- 1** Entidad empleadora: Universidad del País Vasco  
**Categoría profesional:** Ramón y Cajal  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2011 - 26/06/2016  
**Tipo de entidad:** Universidad  
**Duración:** 5 años - 6 meses - 26 días
- 2** Entidad empleadora: Universidad del País Vasco  
**Categoría profesional:** Contrato Juan de la Cierva  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2009 - 31/12/2010  
**Tipo de entidad:** Universidad  
**Duración:** 2 años
- 3** Entidad empleadora: Physical and Theoretical Chemistry Lab., Oxford University  
**Categoría profesional:** Research Fellowship (Department Staff)  
**Fecha de inicio-fin:** 01/06/2008 - 31/10/2008  
**Duración:** 5 meses
- 4** Entidad empleadora: Physical and Theoretical Chemistry Lab., Oxford University  
**Categoría profesional:** MEC postdoctoral contract  
**Fecha de inicio-fin:** 01/06/2006 - 31/05/2008  
**Tipo de entidad:** Universidad  
**Duración:** 2 años
- 5** Entidad empleadora: Universidad de Valladolid  
**Categoría profesional:** Contrato de titulado superior de investigación  
**Fecha de inicio-fin:** 01/05/2006 - 31/05/2006  
**Tipo de entidad:** Universidad  
**Duración:** 1 mes
- 6** Entidad empleadora: Universidad de Valladolid  
**Categoría profesional:** Becario FPU  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2003 - 30/04/2006  
**Tipo de entidad:** Universidad  
**Duración:** 3 años - 4 meses
- 7** Entidad empleadora: Universidad de Valladolid  
**Categoría profesional:** Becario UVA-Caja Duero  
**Fecha de inicio-fin:** 01/05/2002 - 31/12/2002  
**Tipo de entidad:** Universidad  
**Duración:** 8 meses
- 8** Entidad empleadora: Universidad de Valladolid  
**Categoría profesional:** Becario Fundación Ramón Areces  
**Fecha de inicio-fin:** 01/11/2001 - 30/04/2002  
**Tipo de entidad:** Universidad  
**Duración:** 1 año - 4 meses
- 9** Entidad empleadora: Universidad de Valladolid  
**Categoría profesional:** Becario de colaboración  
**Fecha de inicio-fin:** 01/12/2000 - 30/06/2001  
**Tipo de entidad:** Universidad  
**Duración:** 7 meses



## Formación académica recibida

### Titulación universitaria

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

**Titulación universitaria:** Titulado Superior

**Nombre del título:** Licenciado en Química

**Entidad de titulación:** Universidad de Valladolid

**Tipo de entidad:** Universidad

**Fecha de titulación:** 24/09/2001

### Doctorados

**Programa de doctorado:** Estudios en química avanzada

**Entidad de titulación:** Universidad de Valladolid

**Tipo de entidad:** Universidad

**Fecha de titulación:** 16/12/2005

**Título de la tesis:** Estructura de alfa-aminoácidos en fase gas

**Director/a de tesis:** José L. Alonso

**Codirector/a de tesis:** Alberto Lesarri

**Calificación obtenida:** Sobresaliente CUM LAUDE

**Premio extraordinario doctor:** Si

**Fecha de obtención:** 2008

**Título homologado:** Si

**Fecha de homologación:** 2005

### Conocimiento de idiomas

Idioma	Comprensión auditiva	Comprensión de lectura	Interacción oral	Expresión oral	Expresión escrita
Inglés		C1	C1	C1	C1

## Actividad docente

### Formación académica impartida

**1 Nombre de la asignatura/curso:** Química II

**Titulación universitaria:** Grado en Geología

**Fecha de inicio:** 01/09/2016

**Fecha de finalización:** 31/07/2020

**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco

**Tipo de entidad:** Universidad

**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Ciencia y Tecnología



- 2** **Nombre de la asignatura/curso:** Química II  
**Titulación universitaria:** Grado en Física  
**Fecha de inicio:** 01/09/2014 **Fecha de finalización:** 31/08/2015  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad  
**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Ciencia y Tecnología
- 3** **Nombre de la asignatura/curso:** Química Física II  
**Titulación universitaria:** Grado en Química  
**Fecha de inicio:** 01/09/2013 **Fecha de finalización:** 31/08/2015  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad  
**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Ciencia y Tecnología
- 4** **Nombre de la asignatura/curso:** Proyecto Fin de Máster  
**Titulación universitaria:** Escuela de Master y Doctorado  
**Fecha de inicio:** 2013 **Fecha de finalización:** 2014  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad  
**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Ciencia y Tecnología
- 5** **Nombre de la asignatura/curso:** Introducción a la Experimentación en Química Física I / 4º  
**Titulación universitaria:** Licenciado en Química  
**Fecha de inicio:** 01/09/2012 **Fecha de finalización:** 31/08/2013  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad  
**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Ciencia y Tecnología
- 6** **Nombre de la asignatura/curso:** Fundamento del láser y operación de sistemas láser  
**Titulación universitaria:** Máster Quimilaser  
**Fecha de inicio:** 01/09/2010 **Fecha de finalización:** 31/08/2012  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad  
**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Ciencia y Tecnología
- 7** **Nombre de la asignatura/curso:** Fundamentos de Espectroscopía láser  
**Titulación universitaria:** Máster Quimilaser  
**Fecha de inicio:** 01/09/2010 **Fecha de finalización:** 31/08/2012  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad  
**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Ciencia y Tecnología
- 8** **Nombre de la asignatura/curso:** Espectroscopía Molecular / 4º  
**Titulación universitaria:** Licenciado en Química  
**Fecha de inicio:** 01/09/2004 **Fecha de finalización:** 31/08/2006  
**Entidad de realización:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad  
**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Ciencias
- 9** **Nombre de la asignatura/curso:** Laboratorio de técnicas instrumentales y del láser en Química / 5º  
**Titulación universitaria:** Licenciado en Química  
**Fecha de inicio:** 01/09/2004 **Fecha de finalización:** 31/08/2006  
**Entidad de realización:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad  
**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Ciencias



## Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

- Título del trabajo:** 2F-D-Galaktosaren analisi konformazionala kimika konputazionalaren bitartez  
**Tipo de proyecto:** Proyecto Final de Carrera  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Julen Bueno  
**Calificación obtenida:** 7.3  
**Fecha de defensa:** 10/07/2019
- Título del trabajo:** Efectos conformacionales en la longitud de la cadena alifática de los anestésicos locales: un estudio rotacional del Isobutamben  
**Tipo de proyecto:** Trabajo conducente a obtención de DEA  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Mainer Parra  
**Calificación obtenida:** 9.5  
**Fecha de defensa:** 10/07/2019
- Título del trabajo:** Análisis y determinación estructural de las glucaminas mediante espectroscopía rotacional  
**Tipo de proyecto:** Proyecto Final de Carrera  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Mikel Ortega  
**Calificación obtenida:** 5.4  
**Fecha de defensa:** 14/09/2018
- Título del trabajo:** Estudio de moléculas orgánicas por espectroscopía de microondas y cálculos mecano-cuánticos. Resolviendo discrepancias entre experimentos y teoría: Jasmonato de metilo y zingerone  
**Tipo de proyecto:** Trabajo conducente a obtención de DEA  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Aran Insausti  
**Calificación obtenida:** 9.5  
**Fecha de defensa:** 17/07/2018
- Título del trabajo:** Modern rotational spectroscopy as a versatile tool in Chemistry  
**Tipo de proyecto:** Tesis Doctoral  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Iciar Uriarte  
**Calificación obtenida:** Sobresaliente CUM LAUDE  
**Fecha de defensa:** 15/06/2018  
**Doctorado Europeo:** Si  
**Mención de calidad:** Si
- Título del trabajo:** Determinación del mecanismo de degradación de la perovskita CH<sub>3</sub>NH<sub>3</sub>PbI<sub>3</sub>: Espectroscopía de microondas como técnica analítica  
**Tipo de proyecto:** Proyecto Final de Carrera  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Jon Arambarri  
**Calificación obtenida:** 7  
**Fecha de defensa:** 15/09/2017



- 7** **Título del trabajo:** Difluorometano-ura agregazioen ikerketa errotazionala mikrouhineko espektroskopiaren bitartez  
**Tipo de proyecto:** Proyecto Final de Carrera  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Mikel Astroquiza  
**Calificación obtenida:** 9  
**Fecha de defensa:** 13/07/2017
- 8** **Título del trabajo:** Structure and Intermolecular Interactions of Relevant Molecules  
**Tipo de proyecto:** Tesis Doctoral  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Imanol Usabiaga  
**Calificación obtenida:** Sobresaliente Cum Laude  
**Fecha de defensa:** 28/06/2017  
**Doctorado Europeo:** Si
- 9** **Título del trabajo:** Estudio estructural por espectroscopía de microondas del oxaciclotridecano-2-ona  
**Tipo de proyecto:** Proyecto Final de Carrera  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** María Amaya Zarraga  
**Calificación obtenida:** 7.7  
**Fecha de defensa:** 14/09/2016
- 10** **Título del trabajo:** Structural studies of biomolecular building blocks & Molecular aggregates  
**Tipo de proyecto:** Tesis Doctoral  
**Entidad de realización:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Montserrat Vallejo López  
**Calificación obtenida:** Sobresaliente Cum Laude (Premio Extraordinario de Doctorado)  
**Fecha de defensa:** 26/09/2014  
**Doctorado Europeo:** Si  
**Mención de calidad:** Si
- 11** **Título del trabajo:** Búsqueda conformacional de un anestésico, utilizando espectroscopía rotacional  
**Tipo de proyecto:** Proyecto Final de Carrera  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Eneko Zabala  
**Calificación obtenida:** 8.3  
**Fecha de defensa:** 16/09/2014
- 12** **Título del trabajo:** Determinación estructural de un anestésico en fase gas: Estudio rotacional del fluroxeno  
**Tipo de proyecto:** Trabajo conducente a obtención de DEA  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Iciar Uriarte  
**Calificación obtenida:** 10 (Matrícula de Honor)  
**Fecha de defensa:** 10/07/2014
- 13** **Título del trabajo:** Montaje y optimización de un sistema de vaporización láser para el estudio de biomoléculas  
**Tipo de proyecto:** Trabajo conducente a obtención de DEA  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Imanol Usabiaga  
**Calificación obtenida:** 9



Fecha de defensa: 14/09/2012

## Otras actividades/méritos no incluidos en la relación anterior

- 1 Descripción de la actividad:** Premiul Internacional Dr. BARBARA-MEZ-STARCK  
**Entidad organizadora:** Barbara Mez-Starck Foundation  
**Fecha de finalización:** 2018
- 2 Descripción de la actividad:** Premio ENRIQUE PÉREZ-PAYÁ  
**Entidad organizadora:** Sociedad de Biofísica Española  
**Fecha de finalización:** 2017
- 3 Descripción de la actividad:** Premio FLYGARE  
**Entidad organizadora:** Simposio internacional en Espectroscopía Molecular  
**Fecha de finalización:** 2015
- 4 Descripción de la actividad:** Participant in the conference "Jornada de Formación de Profesorado Novel" promoted by the Vicerrectorado de Calidad e Innovación Docente and the Vicerrectorado de Profesorado  
**Entidad organizadora:** Universidad del País Vasco      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de finalización:** 2012
- 5 Descripción de la actividad:** Premio POSTDOC SusChem Jóvenes Investigadores Químicos.  
**Entidad organizadora:** Suschem      **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones  
**Fecha de finalización:** 2012
- 6 Descripción de la actividad:** Premio SIGMA-ALDRICH a Investigadores noveles de la RSEQ (Real Sociedad Española de Química)  
**Entidad organizadora:** Real Sociedad Española de Química      **Tipo de entidad:** RSEQ  
**Fecha de finalización:** 2012
- 7 Descripción de la actividad:** Premio Extraordinario de Doctorado  
**Entidad organizadora:** Universidad de Valladolid      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de finalización:** 2008



## 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:** Glycopepcancer: A new protocol for potential design of cancer vaccines based on glycopeptides (I-link)  
**Entidad de realización:** Red internacional con 5 centros extranjeros  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Emilio J. Cocinero  
**Nº de investigadores/as:** 9  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Consejo Superior de Investigaciones Científicas      **Tipo de entidad:** Agencia Estatal  
**Ciudad entidad financiadora:** Madrid, Comunidad de Madrid, España  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2020 - 31/12/2022  
**Entidad/es participante/s:** Instituto BiofisiKa Bizkaia; Institute of physics, Polish Academy of Sciences; University of Alberta; University of Southampton; Wilhelm Gottfried Leibniz universität Hannover  
**Cuantía total:** 24.000 €
- 2 Nombre del proyecto:** AntiFreeze GlycoProteins: A structural approach to engineer antifreeze proteins  
**Entidad de realización:** Proyecto Internacional de Cooperación Científica (PICs)  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Emilio J. Cocinero  
**Nº de investigadores/as:** 6  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Consejo Superior de Investigaciones Científicas      **Tipo de entidad:** Agencia Estatal  
**Ciudad entidad financiadora:** Madrid, Comunidad de Madrid, España  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2019 - 31/12/2021  
**Entidad/es participante/s:** Instituto Biofisika Bizkaia; Universite Paris-Saclay  
**Cuantía total:** 10.000 €
- 3 Nombre del proyecto:** Técnicas espectroscópicas y magnéticas avanzadas en investigación molecular y de nanoescala  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Leioa, País Vasco, España  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Francisco J. Basterrexea  
**Nº de investigadores/as:** 20  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Gobierno Vasco      **Tipo de entidad:** GV  
**Ciudad entidad financiadora:** España  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2019 - 31/12/2021  
**Cuantía total:** 179.000 €



- 4** **Nombre del proyecto:** Métodos estructurales de diseño de glicopéptidos para vacunas anticancerígenas (CTQ2017-89150-R)  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Leioa, País Vasco, España  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Emilio J. Cocinero; Francisco J. Basterretxea  
**Nº de investigadores/as:** 7  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Ministerio de Economía y Hacienda **Tipo de entidad:** M  
**Ciudad entidad financiadora:** Madrid, Comunidad de Madrid, España  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2018 - 31/12/2020  
**Cuantía total:** 119.790 €
- 5** **Nombre del proyecto:** Estudio de sistemas biológicos y atmosféricos por espectroscopia láser y de microondas de alta resolución.  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco (UPV/EHU)  
**Ciudad entidad realización:** Leioa, País Vasco, España  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Emilio J. Cocinero Pérez; Francisco J. Basterrexea  
**Nº de investigadores/as:** 10  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Dirección General de Investigación. Ministerio de Economía y Competitividad. CTQ2014-54464-R.  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2015 - 31/12/2017  
**Cuantía total:** 124.630 €
- 6** **Nombre del proyecto:** An eye on Glycosciences: A GlycoPhysics network for the development of a carbohydrate-oriented Optical spectroscopy/Mass Spectrometry-based toolkit  
**Entidad de realización:** 7 Centros Europeos. Nuestra parte se hace en la Universidad del País Vasco (UPV/EHU)  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Emilio J. Cocinero  
**Nº de investigadores/as:** 7  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Agence Nationale de la Recherche (ANR) **Tipo de entidad:** Agencia Estatal  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2015 - 31/12/2016  
**Cuantía total:** 50.000 €
- 7** **Nombre del proyecto:** Diagnóstico y Pronóstico de Cánceres Mediante Imagen Por Espectrometría de Masas y Microarrays  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco (UPV/EHU)  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** José A. Fernández  
**Nº de investigadores/as:** 3  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Gobierno Vasco **Tipo de entidad:** S-PE13UN136  
**Ciudad entidad financiadora:** España  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2014 - 31/12/2015  
**Cuantía total:** 6.418,03 €
- 8** **Nombre del proyecto:** XI Simposio de Investigadores Jóvenes de la Real Sociedad Española de Química  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco (UPV/EHU)  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Emilio J. Cocinero  
**Nº de investigadores/as:** 7

**Entidad/es financiadora/s:**

Universidad del País Vasco

**Tipo de entidad:** Universidad**Ciudad entidad financiadora:** Bilbao, País Vasco, España**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2014 - 31/12/2015**Cuantía total:** 5.000 €

- 9 Nombre del proyecto:** XI Simposio de Investigadores Jóvenes de la Real Sociedad Española de Química (RC\_2014\_1\_230)

**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Emilio J. Cocinero**Nº de investigadores/as:** 7**Entidad/es financiadora/s:**

Gobierno Vasco

**Tipo de entidad:** RC\_2014\_1\_230**Ciudad entidad financiadora:** España**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2014 - 31/12/2015**Cuantía total:** 5.998 €

- 10 Nombre del proyecto:** Estudios en femtoquímica, ablación láser, espectroscopía y espectrometría de biomoléculas en fase gas, aerosoles atmosféricos, nanotecnología y nanofabricación

**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco (UPV/EHU)**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Francisco J. Basterrechea**Nº de investigadores/as:** 22**Entidad/es financiadora/s:**

Gobierno Vasco (IT520-10)

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2010 - 31/12/2015**Cuantía total:** 738.000 €

- 11 Nombre del proyecto:** Gas phase investigation of peptide-carbohydrate interactions: structure and energy (PEPSUC)

**Entidad de realización:** Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay CNRS and Universidad del País Vasco**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Emilio J. Cocinero; Pierre Çarcabal**Nº de investigadores/as:** 7**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2012 - 31/12/2014**Cuantía total:** 8.000 €

- 12 Nombre del proyecto:** Nuevas Tecnologías en Química y Farmacología aplicadas al campo de la Salud (UFI)

**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco (UPV/EHU)**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Francisco J. Basterrechea**Nº de investigadores/as:** 12**Entidad/es financiadora/s:**

Universidad del País Vasco (UFI 11/23)

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2012 - 31/12/2014**Cuantía total:** 59.793 €

- 13 Nombre del proyecto:** Desarrollo del oncoslide de membranas celulares como herramienta biotecnológica para la búsqueda de nuevos fármacos antitumorales

**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco (UPV/EHU)**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** José A. Fernández

**Nº de investigadores/as:** 3  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Ministerio de Ciencia e Innovación. ONCOSLIDE

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2011 - 31/12/2014

**Cuantía total:** 155.244 €

- 14 Nombre del proyecto:** Desarrollo del oncoslide de membranas celulares como herramienta biotecnológica para la búsqueda de nuevos fármacos antitumorales

**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco (UPV/EHU)

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** José A. Fernández

**Nº de investigadores/as:** 3

**Entidad/es financiadora/s:**

Ministerio de Ciencia e Innovación. ONCOSLIDE

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2011 - 31/12/2014

**Cuantía total:** 155.244 €

- 15 Nombre del proyecto:** Fármacos: Reconocimiento molecular y microsolvatación mediante espectroscopías laser y de microondas

**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco (UPV/EHU)

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Emilio J. Cocinero

**Nº de investigadores/as:** 5

**Entidad/es financiadora/s:**

Dirección General de Investigación. Ministerio de Ciencia e Innovación. CTQ2011-22923

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2011 - 31/12/2014

**Cuantía total:** 61.710 €

- 16 Nombre del proyecto:** Medicina regenerativa aplicada a lesiones medulares y daños en el sistema nervioso periférico: nuevos productos en terapia avanzada y herramientas en diagnóstico (NEUROREG)

**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco and Institute for Plasma Physics

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** José A. Fernández

**Nº de investigadores/as:** 3

**Entidad/es financiadora/s:**

Ministerio de Ciencia e Innovación. Investigación **Tipo de entidad:** NEUROREG

**Ciudad entidad financiadora:** Madrid, Comunidad de Madrid, España

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2011 - 31/12/2014

- 17 Nombre del proyecto:** Imagen por espectrometría de masas aplicada a la lectura de microarrays para cribado de fármacos

**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco (UPV/EHU)

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** José A. Fernández

**Nº de investigadores/as:** 6

**Entidad/es financiadora/s:**

Diputación Foral de Vizcaya. IMAGEARRAY

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2011 - 31/12/2012

**Cuantía total:** 125.741,4 €

- 18 Nombre del proyecto:** Imagen por espectrometría de masas aplicada al desarrollo de fármacos

**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco (UPV/EHU)

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** José A. Fernández



**Nº de investigadores/as:** 5  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Gobierno Vasco (Saiotek). IMAGIMAS

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2011 - 31/12/2012  
**Cuantía total:** 26.787,02 €

- 19 Nombre del proyecto:** Ciencia y Aplicaciones de los Láseres Ultrarrápidos Ultraintensos  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco (UPV/EHU), Universidad de Murcia, Universidad Complutense, Universidad de Salamanca, Instituto de Ciencias Fotónicas, Universitat Jaume I  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Luis Rosso; Fernando Castaño  
**Nº de investigadores/as:** 11  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Dirección General de Investigación. Ministerio de Educación y Ciencia. Convocatoria CONSOLIDER. CSD2007-00013  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2007 - 31/12/2012  
**Cuantía total:** 4.500.000 €

- 20 Nombre del proyecto:** Osciloscopio de altas prestaciones para Microondas de banda ancha  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco (UPV/EHU)  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Francisco J. Basterrechea  
**Nº de investigadores/as:** 5  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Universidad del País Vasco y Gobierno Vasco (GVINF11/08)  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2011 - 31/12/2011  
**Cuantía total:** 131.500 €

- 21 Nombre del proyecto:** Conformations and associations of carbohydrates – computation and experiment  
**Entidad de realización:** Physical and Theoretical Chemistry Laboratories and Universidad de la Habana  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Lavina Snoek; Luis A. Montero  
**Nº de investigadores/as:** 8  
**Entidad/es financiadora/s:**  
The Royal Society. International Joint Project  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2006 - 31/12/2011

- 22 Nombre del proyecto:** Anesthetic-Receptor Interaction In Gas Phase Using UV/Vis-MW High Resolution Spectroscopy  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco and Institute for Plasma Physics  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** José A. Fernández  
**Nº de investigadores/as:** 4  
**Entidad/es financiadora/s:**  
FELIX, FOM – Institute for Plasma Physics  
**Tipo de entidad:** Instituto Universitario de Investigación  
**Ciudad entidad financiadora:** Holanda  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2010 - 31/12/2010

- 23 Nombre del proyecto:** Anesthetic-Receptor Interaction In Gas Phase Using UV/Vis-MW High Resolution Spectroscopy (part II)  
**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco and Institute for Plasma Physics  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** José A. Fernández



**Nº de investigadores/as:** 5

**Entidad/es financiadora/s:**

FELIX, FOM – Institute for Plasma Physics

**Tipo de entidad:** Instituto Universitario de Investigación

**Ciudad entidad financiadora:** Holanda

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2010 - 31/12/2010

**24 Nombre del proyecto:** Nuevas tecnologías de espectrometría de masas y microarrays aplicadas a la caracterización de fármacos y biomoléculas

**Entidad de realización:** Gobierno Vasco (Departamento de Industria)

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Rafael Rodríguez Puertas

**Nº de investigadores/as:** 22

**Entidad/es financiadora/s:**

Gobierno Vasco (INTEK-N09/02)

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2010 - 31/12/2010

**Cuantía total:** 15.569,8 €

**25 Nombre del proyecto:** Espectrometría de masas MALDI-TOF aplicada la detección de fármacos y metabolitos

**Entidad de realización:** Universidad del País Vasco (UPV/EHU)

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** José A. Fernández

**Nº de investigadores/as:** 5

**Entidad/es financiadora/s:**

Gobierno Vasco (Saiotek)

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2008 - 31/12/2010

**Cuantía total:** 43.005,54 €

**26 Nombre del proyecto:** Probing the Glycosidic Linkage: from Glucose to Glycobiology

**Entidad de realización:** Physical and Theoretical Chemistry Laboratories. Oxford University

**Ciudad entidad realización:** Oxford, Reino Unido

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Benjaming G. Davis; John P. Simons

**Nº de investigadores/as:** 8

**Entidad/es financiadora/s:**

Engineering and Physical Sciences Research Council (EPSRC)

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2005 - 31/12/2010

**Cuantía total:** 810.000 €

**27 Nombre del proyecto:** Structural Motifs in Peptides, Glycans and Glycopeptides

**Entidad de realización:** Physical and theoretical Chemistry Laboratories and Commissariat à l'Energie Atomique (CEA)

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Lavina Snoek; Michel Mons

**Nº de investigadores/as:** 10

**Entidad/es financiadora/s:**

British Council. Alliance: Franco – British research partnership programme

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2006 - 31/12/2008

**Cuantía total:** 6.900 €



- 28** **Nombre del proyecto:** Estructura y reactividad de biomoléculas  
**Entidad de realización:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Valladolid, Castilla y León, España  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** José L. Alonso  
**Nº de investigadores/as:** 13  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Junta de Castilla y León (VA012C05) – Grupo de excelencia  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2005 - 31/12/2008  
**Cuantía total:** 103.700 €
- 29** **Nombre del proyecto:** How will glycosylation alter the backbone structure of glycoprotein building blocks?  
**Entidad de realización:** Physical and theoretical Chemistry Laboratories and Institute for Plasma Physics  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Benjamin G. Davis; Jonh P. Simons  
**Nº de investigadores/as:** 6  
**Entidad/es financiadora/s:**  
FELIX, FOM – Institute for Plasma Physics **Tipo de entidad:** Instituto Universitario de Investigación  
**Ciudad entidad financiadora:** Holanda  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2007 - 31/12/2007
- 30** **Nombre del proyecto:** Equipamiento científico para unidad pluridisciplinar de Espectrometría de masas  
**Entidad de realización:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Valladolid, Castilla y León, España  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** José L. Alonso; José L. Bernal  
**Nº de investigadores/as:** 12  
**Entidad/es financiadora/s:**  
DGI – Ministerio de Ciencia y Tecnología (Fondos FEDER de Investigación), Universidad de Valladolid (UNIVA05-23-027)  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2005 - 31/12/2007  
**Cuantía total:** 453.000 €
- 31** **Nombre del proyecto:** Estructura de aminoácidos y moléculas de interés astrofísico: Técnicas de ablación láser y descarga eléctrica en experimentos en jets supersónicos y espectroscopía de microondas  
**Entidad de realización:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Valladolid, Castilla y León, España  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** José L. Alonso  
**Nº de investigadores/as:** 7  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Dirección General de Investigación. Ministerio de Ciencia y Tecnología. BQU2003-03275  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2004 - 31/12/2006  
**Cuantía total:** 291.200 €
- 32** **Nombre del proyecto:** Técnicas de ablación láser en Espectroscopia molecular: Espectros de rotación de clusters intermetálicos  
**Entidad de realización:** Universidad de Valladolid and Institut für Physikalische Chemie & Elektrochemie (Leibniz-Universität Hannover)  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** José L. Alonso  
**Nº de investigadores/as:** 6  
**Entidad/es financiadora/s:**



Ministerio de Ciencia y Tecnología. Acciones integradas hispano-alemanas (HA-2002-0014)

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2003 - 31/12/2004

**Cuantía total:** 10.400 €

**33 Nombre del proyecto:** Espectros de rotación en jets supersónicos: Complejos con enlace de hidrógeno

**Entidad de realización:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad realización:** Valladolid, Castilla y León, España

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** José L. Alonso

**Nº de investigadores/as:** 4

**Entidad/es financiadora/s:**

Dirección General de Investigación. Ministerio de Ciencia y Tecnología. BQU2000-0869

**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2001 - 31/12/2003

**Cuantía total:** 154.821 €

### Contratos, convenios o proyectos de I+D+i no competitivos con Administraciones o entidades públicas o privadas

**1 Nombre del proyecto:** Caracterización de Biomarcadores de Cáncer basados en el Antígeno Tn por espectroscopias de alta Resolución

**Grado de contribución:** Coordinador del proyecto total, red o consorcio

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Emilio J. Cocinero

**Nº de investigadores/as:** 1

**Entidad/es participante/s:** Universidad del País Vasco

**Entidad/es financiadora/s:**

FUNDACION BANCO BILBAO-VIZCAYA

**Ciudad entidad financiadora:** España

**Fecha de inicio:** 01/09/2018

**Duración:** 1 año

**Cuantía total:** 30.000 €

**2 Nombre del proyecto:** Desarrollo de algoritmos de procesamiento de información de imagen por Espectroscopía de masas: Implementación en un programa comerciable

**Grado de contribución:** Investigador/a

**Nº de investigadores/as:** 5

**Entidad/es financiadora/s:**

Gobierno Vasco (UE09+/59)

**Fecha de inicio:** 01/01/2010

**Duración:** 1 año

**Cuantía total:** 73.150 €

**3 Nombre del proyecto:** Generación y caracterización en Jets supersónicos de sistemas moleculares de interés biológico

**Grado de contribución:** Titulado/a universitario/a en formación

**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** José L. Alonso

**Nº de investigadores/as:** 5

**Entidad/es participante/s:** Universidad de Valladolid

**Entidad/es financiadora/s:**

Fundación Ramón Areces

**Tipo de entidad:** Fundación

**Ciudad entidad financiadora:** Madrid, Comunidad de Madrid, España

**Fecha de inicio:** 2001

**Duración:** 1 año



Cuantía total: 72.121 €

## Actividades científicas y tecnológicas

### Producción científica

#### Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1 Calabrese, Camilla; Li, Weixing; Prampolini, Giacomo; Evangelisti, Luca; Uriarte, Iciar; Cacelli, Ivo; Melandri, Sonia; Cocinero, Emilio J. A General Treatment to Study Molecular Complexes Stabilized by Hydrogen-, Halogen-, and Carbon-Bond Networks: Experiment and Theory of  $(\text{CH}_2\text{F}_2)_n$  center dot center dot center dot  $(\text{H}_2\text{O})_m$ . ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION. 58, pp. 8525 - 8530. 2019. ISSN 1433-7851  
**DOI:** 10.1002/anie.201902753  
**PMID:** 30997948  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Autor de correspondencia:** Si  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY  
**Índice de impacto:** 12.257 **Revista dentro del 25%:** Si  
**Posición de publicación:** 17 **Num. revistas en cat.:** 172  
**Fuente de citas:** WOS **Citas:** 3  
**Publicación relevante:** Si
- 2 Calabrese, Camilla; Ecija, Patricia; Companon, Ismael; Vallejo-Lopez, Montserrat; Cimas, Alvaro; Parra, Maider; Basterretxea, Francisco J.; Santos, Jose I.; Jimenez-Barbero, Jesus; Lesarri, Alberto; Corzana, Francisco; Cocinero, Emilio J. Conformational Behavior of D-Lyxose in Gas and Solution Phases by Rotational and NMR Spectroscopies. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS. 10, pp. 3339 - 3345. 2019. ISSN 1948-7185  
**DOI:** 10.1021/acs.jpcclett.9b00978  
**PMID:** 31141365  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Autor de correspondencia:** Si  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, ORGANIC  
**Índice de impacto:** 7.329 **Revista dentro del 25%:** Si  
**Posición de publicación:** 28 **Num. revistas en cat.:** 148  
**Fuente de citas:** WOS **Citas:** 1  
**Publicación relevante:** Si
- 3 Uriarte, Iciar; Insausti, Aran; Cocinero, Emilio J.; Jabri, Atef; Kleiner, Isabelle; Mouhib, Halima; Alkorta, Ibon. Competing Dispersive Interactions: From Small Energy Differences to Large Structural Effects in Methyl Jasmonate and Zingerone. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS. 9, pp. 5906 - 5914. 2018. ISSN 1948-7185  
**DOI:** 10.1021/acs.jpcclett.8b02339  
**PMID:** 30234988  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Autor de correspondencia:** Si  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Índice de impacto:** 7.329 **Revista dentro del 25%:** Si

**Posición de publicación:** 28**Fuente de citas:** WOS**Publicación relevante:** Si**Num. revistas en cat.:** 148**Citas:** 5

- 4** Uriarte, Iciar; Melandri, Sonia; Maris, Assimo; Calabrese, Camilla; Cocinero, Emilio J. Shapes, Dynamics, and Stability of beta-Ionone and Its Two Mutants Evidenced by High-Resolution Spectroscopy in the Gas Phase. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY LETTERS. 9, pp. 1497 - 1502. 2018. ISSN 1948-7185

**DOI:** 10.1021/acs.jpcllett.8b00256**PMID:** 29510049**Tipo de producción:** Artículo científico**Autor de correspondencia:** Si**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 7.329**Posición de publicación:** 4**Fuente de citas:** WOS**Publicación relevante:** Si**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 36**Citas:** 5

- 5** Bermejo, Iris A.; Usabiaga, Imanol; Companon, Ismael; Castro-Lopez, Jorge; Insausti, Aran; Fernandez, Jose A.; Avenoza, Alberto; Busto, Jesus H.; Jimenez-Barbero, Jesus; Asensio, Juan L.; Peregrina, Jesus M.; Jimenez-Oses, Gonzalo; Hurtado-Guerrero, Ramon; Cocinero, Emilio J.; Corzana, Francisco. Water Sculpts the Distinctive Shapes and Dynamics of the Tumor-Associated Carbohydrate Tn Antigens: Implications for Their Molecular Recognition. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 140, pp. 9952 - 9960. 2018. ISSN 0002-7863

**DOI:** 10.1021/jacs.8b04801**PMID:** 30004703**Tipo de producción:** Artículo científico**Autor de correspondencia:** Si**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 14.695**Posición de publicación:** 12**Fuente de citas:** WOS**Publicación relevante:** Si**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 172**Citas:** 12

- 6** Marco Carini; Marta P. Ruiz; Imanol Usabiaga; José A. Fernández; Emilio J. Cocinero; Manuel Melle Franco; Ismael Diez Perez; Aurelio Mateo Alonso. High conductance values in pi-folded molecular junctions. Nature Communications. 8, pp. 15195 - 15204. 2017. Disponible en Internet en: <<https://www.nature.com/articles/ncomms15195>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 12.124**Posición de publicación:** 3**Publicación relevante:** Si**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** Multidisciplinary Sciences**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 64

- 7** Uriarte, Iciar; Reviriego, Felipe; Calabrese, Camilla; Elguero, Jose; Kisiel, Zbigniew; Alkorta, Ibon; Cocinero, Emilio J. Bond Length Alternation Observed Experimentally: The Case of 1H-Indazole. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 25, pp. 10172 - 10178. 2019. ISSN 0947-6539

**DOI:** 10.1002/chem.201901666



**PMID:** 31166628

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Autor de correspondencia:** Si

**Fuente de citas:** WOS

**Citas:** 1

- 8** Juarez-Perez, Emilio J.; Ono, Luis K.; Uriarte, Iciar; Cocinero, Emilio J.; Qi, Yabing. Degradation Mechanism and Relative Stability of Methylammonium Halide Based Perovskites Analyzed on the Basis of Acid Base Theory. ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES. 11, pp. 12586 - 12593. 2019. ISSN 1944-8244

**DOI:** 10.1021/acsami.9b02374

**PMID:** 30848116

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

**Índice de impacto:** 8.456

**Revista dentro del 25%:** Si

**Posición de publicación:** 16

**Num. revistas en cat.:** 94

**Fuente de citas:** WOS

**Citas:** 8

- 9** Spada, Lorenzo; Uriarte, Iciar; Li, Weixing; Evangelisti, Luca; Cocinero, Emilio J.; Caminati, Walther. Interactions between azines and alcohols: a rotational study of pyridine-tert-butyl alcohol. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 21, pp. 3545 - 3549. 2019. ISSN 1463-9076

**DOI:** 10.1039/c8cp04462g

**PMID:** 30168540

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

**Índice de impacto:** 3.567

**Posición de publicación:** 55

**Num. revistas en cat.:** 148

**Fuente de citas:** WOS

**Citas:** 1

- 10** Uriarte, Iciar; Ecija, Patricia; Lozada-Garcia, Rolando; Carcabal, Pierre; Cocinero, Emilio J. Investigating the Conformation of the Bridged Monosaccharide Levoglucosan. CHEMPHYSICHEM. 19, pp. 766 - 773. 2018. ISSN 1439-4235

**DOI:** 10.1002/cphc.201701242

**PMID:** 29194904

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Autor de correspondencia:** Si

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

**Índice de impacto:** 3.077

**Posición de publicación:** 10

**Num. revistas en cat.:** 36

**Fuente de citas:** WOS

**Citas:** 4

- 11** Usabiaga, Imanol; Camiruaga, Ander; Insausti, Aran; Carcabal, Pierre; Cocinero, Emilio J.; Leon, Iker; Fernandez, Jose A. Phenyl-beta-D-glucopyranoside and Phenyl-beta-D-galactopyranoside Dimers: Small Structural Differences but Very Different Interactions. FRONTIERS IN PHYSICS. 6 - 3, 2018. ISSN 2296-424X

**DOI:** 10.3389/fphy.2018.00003

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, MULTIDISCIPLINARY

**Índice de impacto:** 1.895

**Posición de publicación:** 36

**Fuente de citas:** WOS

**Num. revistas en cat.:** 81

**Citas:** 2

- 12** Kisiel, Zbigniew; Pszczolkowski, Lech; Bialkowska-Jaworska, Ewa; Jaworski, Marek; Uriarte, Iciar; Basterretxea, Francisco J.; Cocinero, Emilio J. Rotational spectroscopy update for the newly identified atmospheric ozone depleter CF<sub>3</sub>CCI<sub>3</sub>. JOURNAL OF MOLECULAR SPECTROSCOPY. 352, pp. 37 - 45. 2018. ISSN 0022-2852  
**DOI:** 10.1016/j.jms.2018.07.005

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 2.225

**Posición de publicación:** 18

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

**Num. revistas en cat.:** 36

- 13** Iciar Uriarte; Zbigniew Kisiel; Ewa Białkowska-Jaworska; Lech Pszczółkowski; Patricia Ecija; Francisco J. Basterretxea; Emilio J. Cocinero. Comprehensive rotational spectroscopy of the newly identified atmospheric ozone depleter CF<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>Cl. Journal of Molecular Spectroscopy. 337 - Supplement C, pp. 37 - 45. 2017. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022285217300747>>. ISSN 0022-2852

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 1.618

**Posición de publicación:** 24

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Physics, Atomic, molecular & Chemical

**Revista dentro del 25%:** No

**Num. revistas en cat.:** 35

- 14** Camilla Calabrese; Assimo Maris; Iciar Uriarte; Emilio J. Cocinero; Sonia Melandri. Effects of Chlorination on the Tautomeric Equilibrium of 2-Hydroxypyridine: Experiment and Theory. Chemistry – A European Journal. 23 - 15, pp. 3595 - 3604. 2017. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/chem.201604891>>. ISSN 1521-3765

**Tipo de producción:** Artículo científico

**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

**Resultados relevantes:** Paper qualified as Hot Paper by the Journal. Journal Cover.

- 15** Imanol Usabiaga; Jorge González; Iker León; Pedro F. Arnaiz; Emilio J. Cocinero; José A. Fernández. Influence of the Anomeric Conformation in the Intermolecular Interactions of Glucose. The Journal of Physical Chemistry Letters. 8 - 6, pp. 1147 - 1151. 2017. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcllett.7b00151>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 9.353

**Posición de publicación:** 14

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Chemistry, Physical

**Revista dentro del 25%:** Si

**Num. revistas en cat.:** 145

**Resultados relevantes:** Paper Spotlight by the Journal.

- 16** Montserrat Vallejo-López; Patricia Écija; Natalja Vogt; Jean Demaison; Alberto Lesarri; Francisco J. Basterrechea; Emilio J. Cocinero. N-methyl Inversion and Accurate Equilibrium Structures in Alkaloids: Pseudopelletierine. Chemistry – A European Journal. pp. n/a - n/a. 2017. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/chem.201702232>>. ISSN 1521-3765

**Tipo de producción:** Artículo científico

**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



**Resultados relevantes:** Paper qualified as Hot Paper by the Journal. Journal Cover.

- 17** Iciar Uriarte; Cristóbal Pérez; Elena Caballero-Mancebo; Francisco J. Basterretxea; Alberto Lesarri; José A. Fernández; Emilio J. Cocinero. Structural Studies of Nicotinoids: Cotinine versus Nicotine. Chemistry – A European Journal. 23 - 30, pp. 7238 - 7244. 2017. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/chem.201700023>>. ISSN 1521-3765

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Chemistry, Multidisciplinary

**Índice de impacto:** 5.731

**Revista dentro del 25%:** Si

**Posición de publicación:** 22

**Num. revistas en cat.:** 157

**Resultados relevantes:** Paper qualified as Hot Paper by the Journal. Journal Cover.

- 18** Ander Camiruaga; Imanol Usabiaga; Aran Insausti; Emilio J. Cocinero; Iker Leon; Jose A. Fernandez. Understanding the role of tyrosine in glycogenin. Mol. BioSyst. 13, pp. 1709 - 1712. The Royal Society of Chemistry, 2017. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/C7MB00293A>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Biochemistry & Molecular Biology

**Índice de impacto:** 2.781

**Revista dentro del 25%:** No

**Posición de publicación:** 144

**Num. revistas en cat.:** 286

- 19** Patricia Ecija; Iciar Uriarte; Lorenzo Spada; Benjamin G. Davis; Walther Caminati; Francisco J. Basterretxea; Alberto Lesarri; Emilio J. Cocinero. Furanosic forms of sugars: conformational equilibrium of methyl [small beta]-d-ribofuranoside. Chem. Commun. 52, pp. 6241 - 6244. The Royal Society of Chemistry, 2016. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/C6CC01180B>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Chemistry, Multidisciplinary

**Índice de impacto:** 6.319

**Revista dentro del 25%:** Si

**Posición de publicación:** 23

**Num. revistas en cat.:** 166

- 20** Qian Gou?; Lorenzo Spada; Montserrat Vallejo-Lopez?; Sonia Melandri; Alberto Lesarri; Emilio J. Cocinero; Walther Caminati. Intermolecular Hydrogen Bonding in 2-Fluoropyridine-Water. ChemistrySelect. 1 - 6, pp. 1273 - 1277. 2016. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/slct.201600370>>. ISSN 2365-6549

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

- 21** Imanol Usabiaga; Jorge Gonzalez; Pedro F. Arnaiz; Iker Leon; Emilio J. Cocinero; Jose A. Fernandez. Modeling the tyrosine-sugar interactions in supersonic expansions: glucopyranose-phenol clusters. Phys. Chem. Chem. Phys. 18, pp. 12457 - 12465. The Royal Society of Chemistry, 2016. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/C6CP00560H>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Chemistry, Physical

**Índice de impacto:** 4.493

**Revista dentro del 25%:** Si

**Posición de publicación:** 32

**Num. revistas en cat.:** 139

**Resultados relevantes:** Journal Cover

- 22** Iciar Uriarte; Patricia Ecija; Lorenzo Spada; Eneko Zabalza; Alberto Lesarri; Francisco J. Basterretxea; Jose A. Fernandez; Walther Caminati; Emilio J. Cocinero. Potential energy surface of fluoroxene: experiment and theory. Phys. Chem. Chem. Phys. 18, pp. 3966 - 3974. The Royal Society of Chemistry, 2016. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/C5CP06522D>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista



**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 4.493  
**Posición de publicación:** 32

**Categoría:** Chemistry, Physical  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 139

- 23** Patricia Écija; Montserrat Vallejo-López; Iciar Uriarte; Francisco J. Basterretxea; Alberto Lesarri; José A. Fernández; Emilio J. Cocinero. Scopine Isolated in the Gas Phase. ChemPhysChem. 17 - 19, pp. 3030 - 3034. 2016. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/cphc.201600368>>. ISSN 1439-7641

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Chemistry, Physical

**Índice de impacto:** 3.138

**Resultados relevantes:** Paper qualified as VIP (Very Important paper) by the Journal.

- 24** Laura B. Favero; Iciar Uriarte; Lorenzo Spada; Patricia Écija; Camilla Calabrese; Walther Caminati; Emilio J. Cocinero. Solving the Tautomeric Equilibrium of Purine through Analysis of the Complex Hyperfine Structure of the Four <sup>14</sup>N Nuclei. The Journal of Physical Chemistry Letters. 7 - 7, pp. 1187 - 1191. 2016. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcclett.6b00374>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Chemistry, Physical

**Índice de impacto:** 9.353

**Revista dentro del 25%:** Si

**Posición de publicación:** 14

**Num. revistas en cat.:** 146

- 25** Cristóbal Pérez; Elena Caballero-Mancebo; Alberto Lesarri; Emilio J. Cocinero; Ibon Alkorta; Richard D. Suenram; Jens-Uwe Grabow; Brooks H. Pate. The Conformational Map of Volatile Anesthetics: Enflurane Revisited. Chemistry – A European Journal. 22 - 28, pp. 9804 - 9811. 2016. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/chem.201601201>>. ISSN 1521-3765

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** 5.731

**Índice de impacto:** 5.731

**Revista dentro del 25%:** Si

**Posición de publicación:** 22

**Num. revistas en cat.:** 157

- 26** Natalja Vogt; Jean Demaison; Emilio J. Cocinero; Patricia Écija; Alberto Lesarri; Heinz Dieter Rudolph; Jurgen Vogt. The equilibrium molecular structures of 2-deoxyribose and fructose by the semiexperimental mixed estimation method and coupled-cluster computations. Phys. Chem. Chem. Phys. 18, pp. 15555 - 15563. The Royal Society of Chemistry, 2016. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/C6CP01842D>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Chemistry, Physical

**Índice de impacto:** 4.493

**Revista dentro del 25%:** Si

**Posición de publicación:** 32

**Num. revistas en cat.:** 139

- 27** J. González; I. Baños; I. León; J. Contreras-García; E. J. Cocinero; A. Lesarri; J. A. Fernández; J. Millán. Unravelling Protein–DNA Interactions at Molecular Level: A DFT and NCI Study. Journal of Chemical Theory and Computation. 12 - 2, pp. 523 - 534. 2016. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00330>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Chemistry, Physical

**Índice de impacto:** 5.498

**Revista dentro del 25%:** Si

**Posición de publicación:** 27

**Num. revistas en cat.:** 139

- 28** Nathan A. Seifert; Cristobal Perez; Justin L. Neill; Brooks H. Pate; Montserrat Vallejo-Lopez; Alberto Lesarri; Emilio J. Cocinero; Fernando Castano. Chiral recognition and atropisomerism in the sevoflurane dimer. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17, pp. 18282 - 18287. The Royal Society of Chemistry, 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/C5CP01025J>>.
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**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
- Resultados relevantes:** Journal front cover.
- 29** Michaela K. Jahn; Estibaliz Mendez; K. P. Rajappan Nair; Peter D. Godfrey; Don McNaughton; Patricia Ecija; Francisco J. Basterretxea; Emilio J. Cocinero; Jens-Uwe Grabow. Conformational steering in dicarboxy acids: the native structure of succinic acid. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17, pp. 19726 - 19734. The Royal Society of Chemistry, 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/C4CP05905K>>.
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 4.493  
**Posición de publicación:** 32
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Journal front cover.  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 139
- Resultados relevantes:** Journal cover.
- 30** Qian Gou; Gang Feng; Luca Evangelisti; Montserrat Vallejo-López; Lorenzo Spada; Alberto Lesarri; Emilio J. Cocinero; Walther Caminati. Internal Dynamics in Halogen-Bonded Adducts: A Rotational Study of Chlorotrifluoromethane–Formaldehyde. *Chemistry – A European Journal*. 21 - 10, pp. 4148 - 4152. WILEY-VCH Verlag, 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/chem.201406122>>. ISSN 1521-3765
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**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
- 31** Milind M. Deshmukh; Shridhar R. Gadre; Emilio J. Cocinero. Stability of conformationally locked free fructose: theoretical and computational insights. *New J. Chem.* 39, pp. 9006 - 9018. The Royal Society of Chemistry, 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/C5NJ02106E>>.
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.277  
**Posición de publicación:** 50
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Chemistry, Multidisciplinary  
**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 173
- 32** Patricia Écija; Iciar Uriarte; Francisco J. Basterretxea; Judith Millán; Alberto Lesarri; José A. Fernández; Emilio J. Cocinero. Structural Distortion of the Epoxy Groups in Norbornanes: A Rotational Study of exo-2,3-Epoxynorbornane. *ChemPhysChem*. 16 - 12, pp. 2609 - 2614. WILEY-VCH Verlag, 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/cphc.201500334>>. ISSN 1439-7641
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.138
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Chemistry, Physical
- 33** Jean Demaison; Norman C Craig; Peter Groner; Patricia Ecija; Emilio J Cocinero; Alberto Lesarri; Heinz Dieter Rudolph. Accurate Equilibrium Structures for Piperidine and Cyclohexane. *The Journal of Physical Chemistry A*. pp. aceptado. American Chemical Society, 16/07/2014. ISSN 1520-5215
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Tipo de soporte:** Revista



**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 2.771  
**Posición de publicación:** 50

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 135

- 34** Gang Feng; Qian Gou; Luca Evangelisti; Montserrat Vallejo-Lopez; Alberto Lesarri; Emilio J. Cocinero; Walther Caminati. Competition between weak hydrogen bonds: C-HCl is preferred to C-HF in CH<sub>2</sub>ClF-H<sub>2</sub>CO<sub>2</sub> as revealed by rotational spectroscopy. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 16, pp. 12261 - 12265. The Royal Society of Chemistry, 28/06/2014. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/C4CP00919C>>. ISSN 1463-9084

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.829  
**Posición de publicación:** 32

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 135

- 35** Qian Gou; Lorenzo Spada; Montserrat Vallejo López; Alberto Lesarri; Emilio J Cocinero; Walther Caminati. Interactions between alkanes and aromatic molecules: a rotational study of pyridine-methane. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 16 - 26, pp. 13041 - 13047. Royal Society of Chemistry, 11/06/2014. Disponible en Internet en: <<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2014/cp/c4cp00204k#>>. ISSN 1463-9084

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.829  
**Posición de publicación:** 32

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 135

**Resultados relevantes:** Journal front cover

- 36** Patricia Écija; Luca Evangelisti; Montserrat Vallejo; Francisco J Basterretxea; Alberto Lesarri; Fernando Castaño; Walther Caminati; Emilio J Cocinero. Conformational flexibility of mephenesin. *The Journal of Physical Chemistry B*. 118 - 20, pp. 5357 - 5421. American Chemical Society, 22/05/2014. ISSN 1520-5207

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.607  
**Posición de publicación:** 35

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 135

- 37** Qian Gou; Lorenzo Spada; Emilio J. Cocinero; Walther Caminati. Halogen-Halogen Links and Internal Dynamics in Adducts of Freons. *Journal of Physical Chemistry Letters*. 5 - 9, pp. 1591 - 1595. 16/04/2014. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jz500600w>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 6.585  
**Posición de publicación:** 15

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 135

- 38** Patricia Ecija; Montserrat Vallejo López; Luca Evangelisti; José A Fernández; Alberto Lesarri; Walther Caminati; Emilio J Cocinero. O-H...N and C-H...O hydrogen bonds control hydration of pivotal tropane alkaloids: tropinone...H(2)O complex. *ChemPhysChem*. 15 - 5, pp. 918 - 941. (Alemania): Wiley-V C H Verlag GmbH, 04/04/2014. ISSN 1439-7641

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.349  
**Posición de publicación:** 42

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 135

**Resultados relevantes:** Paper qualified as VIP (Very Important paper) by the Journal



- 39** Nathan A Seifert; Daniel P Zaleski; Cristóbal Pérez; Justin L Neill; Brooks H Pate; Montserrat Vallejo López; Alberto Lesarri; Emilio J Cocinero; Fernando Castaño; Isabelle Kleiner. Probing the C-H $\cdots$  $\pi$  weak hydrogen bond in anesthetic binding: the sevoflurane-benzene cluster. *Angewandte Chemie International Edition*. 53 - 12, pp. 3210 - 3213. (Alemania): 17/03/2014. ISSN 1521-3773
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 13.455  
**Posición de publicación:** 7
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 152
- 40** Qian Gou; Gang Feng; Luca Evangelisti; Montserrat Vallejo López; Lorenzo Spada; Alberto Lesarri; Emilio J Cocinero; Walther Caminati. How water interacts with halogenated anesthetics: the rotational spectrum of isoflurane-water. *Chemistry – A European Journal*. 20 - 7, pp. 1980 - 1984. (Alemania): Wiley-V C H Verlag GmbH, 10/02/2014. ISSN 1521-3765
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 5.831  
**Posición de publicación:** 21
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 152
- 41** Lorenzo Spada; Qian Gou; Montserrat Vallejo López; Alberto Lesarri; Emilio J Cocinero; Walther Caminati. Weak C-H $\cdots$ N and C-H $\cdots$ F hydrogen bonds and internal rotation in pyridine-CH<sub>3</sub>F. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 16 - 5, pp. 2149 - 2202. Royal Society of Chemistry, 07/02/2014. ISSN 1463-9084
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.829  
**Posición de publicación:** 32
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 135
- 42** Montserrat Vallejo-López; Lorenzo Spada; Qian Gou; Alberto Lesarri; Emilio J. Cocinero; Walther Caminati. Interactions between freons and aromatic molecules: The rotational spectrum of pyridine-difluoromethane. *Chemical Physics Letters*. 591 - 0, pp. 216 - 219. Elsevier Science BV, 20/01/2014. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S000926141301453X>>. ISSN 0009-2614
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 2.145  
**Posición de publicación:** 67
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 135
- 43** Iker Leon; Imanol Usabiaga; Judith Millan; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Jose A. Fernandez. Mimicking anesthetic-receptor interactions in jets: the propofol-isopropanol cluster. *Physical Chemistry Chemical Physics*. pp. in press. The Royal Society of Chemistry, 2014. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/C4CP01702A>>.
- Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.829  
**Posición de publicación:** 32
- Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 135
- Resultados relevantes:** Journal front cover

- 44** Michaela K. Jahn; David A. Dewald; Montserrat Vallejo López; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Wenli Zou; Dieter Cremer; Jens-Uwe Grabow. Pseudorotational Landscape of Seven-Membered Rings: The Most Stable Chair and Twist-Boat Conformers of epsilon-Caprolactone. *Chemistry – A European Journal*. pp. in press. (Alemania): Wiley-V C H Verlag GmbH, 2014.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 5.831  
**Posición de publicación:** 21  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 152
- 45** I. Algorta; C. Cancedda; E. J. Cocinero; J. Z. Dávalos; P. Écija; J. Elguero; J. González; A. Lesarri; R. Ramos; F. Reviriego; C. Roussel; I. Uriarte; N. Vanthuyne. Static and dynamics properties of Binol and its conjugated acids and bases. *Chemistry – A European Journal*. pp. in press. (Alemania): Wiley-V C H Verlag GmbH, 2014.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 5.831  
**Posición de publicación:** 21  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 152
- 46** Iker León; Judith Millán; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; José A. Fernández. Water Encapsulation by Nanomicelles. *Angewandte Chemie International Edition*. pp. accepted. WILEY-VCH Verlag, 2014. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/ange.201405652>>. ISSN 1521-3757  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 13.455  
**Posición de publicación:** 7  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 152
- 47** Michaela K Jahn; David Dewald; Montserrat Vallejo López; Emilio J Cocinero; Alberto Lesarri; Jens-Uwe Grabow. Rotational spectra of bicyclic decanes: the trans conformation of (-)-lupinine. *The Journal of Physical Chemistry A*. 117 - 50, pp. 13673 - 13682. American Chemical Society, 19/12/2013. ISSN 1520-5215  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 2.771  
**Posición de publicación:** 50  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 135
- 48** Conor S Barry; Emilio J Cocinero; Pierre Carçabal; David P Gamblin; E Cristina Stanca Kaposta; Sarah M Remmert; María C Fernández Alonso; Svemir Rudic; John P Simons; Benjamin G Davis. 'Naked' and hydrated conformers of the conserved core pentasaccharide of N-linked glycoproteins and its building blocks. *Journal of the American Chemical Society*. 135 - 45, pp. 16895 - 17798. American Chemical Society, 13/11/2013. ISSN 1520-5126  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 10.677  
**Posición de publicación:** 11  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 152
- 49** Isabel Peña; Emilio J Cocinero; Carlos Cabezas; Alberto Lesarri; Santiago Mata; Patricia Écija; Adam M Daly; Álvaro Cimas; Celina Bermúdez; Francisco J Basterretxea; Susana Blanco; José A Fernández; Juan C López; Fernando Castaño; José L Alonso. Six pyranoside forms of free 2-deoxy-D-ribose. *Angewandte Chemie*



International Edition. 52 - 45, pp. 11840 - 11845. (Alemania): Wiley-V C H Verlag GmbH, 04/11/2013. ISSN 1521-3773

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 13.734

**Posición de publicación:** 7

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

**Revista dentro del 25%:** Si

**Num. revistas en cat.:** 152

- 50** Edurne Aguado; Iker León; Judith Millán; Emilio J Cocinero; Sander Jaex; Anouk M Rijs; Alberto Lesarri; José A Fernández. Unraveling the benzocaine-receptor interaction at molecular level using mass-resolved spectroscopy. *The Journal of Physical Chemistry B.* 117 - 43, pp. 13472 - 13552. American Chemical Society, 31/10/2013. ISSN 1520-5207

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 3.607

**Posición de publicación:** 35

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

**Revista dentro del 25%:** No

**Num. revistas en cat.:** 135

- 51** I. Haykal; L. Margulès; T. R. Huet; R. A. Motyienko; P. Écija; E. J. Cocinero; F. Basterretxea; J. A. Fernández; F. Castaño; A. Lesarri; J. C. Guillemin; B. Tercero; J. Cernicharo. The cm-, mm-, and sub-mm-wave Spectrum of Allyl Isocyanide and Radioastronomical Observations in Orion KL and the SgrB2 Line Surveys. *The Astrophysical Journal.* 777 - 2, pp. 120 - 120. 22/10/2013. Disponible en Internet en: <<http://stacks.iop.org/0004-637X/777/i=2/a=120>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 6.733

**Posición de publicación:** 6

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Astronomy and Astrophysics

**Revista dentro del 25%:** Si

**Num. revistas en cat.:** 56

- 52** Iker León; Judith Millán; Emilio J Cocinero; Alberto Lesarri; José A Fernández. Shaping micelles: the interplay between hydrogen bonds and dispersive interactions. *Angewandte Chemie International Edition.* 52 - 30, pp. 7772 - 7777. (Alemania): Wiley-V C H Verlag GmbH, 22/07/2013. ISSN 1521-3773

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 13.734

**Posición de publicación:** 7

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

**Revista dentro del 25%:** Si

**Num. revistas en cat.:** 152

**Resultados relevantes:** Journal inside cover.

- 53** E Cristina Stanca Kaposta; Pierre Carçabal; Emilio J Cocinero; Paola Hurtado; John P Simons. Carbohydrate-aromatic interactions: vibrational spectroscopy and structural assignment of isolated monosaccharide complexes with p-hydroxy toluene and N-acetyl l-tyrosine methylamide. *The Journal of Physical Chemistry B.* 117 - 27, pp. 8135 - 8177. 11/07/2013. ISSN 1520-5207

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 3.607

**Posición de publicación:** 35

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

**Revista dentro del 25%:** No

**Num. revistas en cat.:** 135

- 54** Patricia Écija; Emilio J Cocinero; Alberto Lesarri; Francisco J Basterretxea; José A Fernández; Fernando Castaño. The distorted tropane of scopoline. *ChemPhysChem.* 14 - 9, pp. 1830 - 1835. (Alemania): Wiley-V C H Verlag GmbH, 24/06/2013. ISSN 1439-7641

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista



**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.349  
**Posición de publicación:** 42

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 135

- 55** Iker León; Judith Millán; Emilio J Cocinero; Alberto Lesarri; José A Fernández. Magic numbers in the solvation of the propofol dimer. *ChemPhysChem*. 14 - 8, pp. 1558 - 1620. (Alemania): Wiley-V C H Verlag GmbH, 03/06/2013. ISSN 1439-7641

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

**Índice de impacto:** 3.349

**Revista dentro del 25%:** No

**Posición de publicación:** 42

**Num. revistas en cat.:** 135

- 56** Qian Gou; Gang Feng; Luca Evangelisti; Montserrat Vallejo López; Alberto Lesarri; Emilio J Cocinero; Walther Caminati. Non-bonding interactions and internal dynamics in CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>···H<sub>2</sub>CO: a rotational and model calculations study. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 15 - 18, pp. 6714 - 6722. Royal Society of Chemistry, 14/05/2013. ISSN 1463-9084

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

**Índice de impacto:** 3.829

**Revista dentro del 25%:** Si

**Posición de publicación:** 32

**Num. revistas en cat.:** 135

- 57** Iker León; Judith Millán; Emilio J Cocinero; Alberto Lesarri; José A Fernández. Transition from planar to nonplanar hydrogen bond networks in the solvation of aromatic dimers: propofol<sub>2</sub>-(H<sub>2</sub>O)<sub>(2-4)</sub>. *The Journal of Physical Chemistry A*. 117 - 16, pp. 3396 - 3800. American Chemical Society, 25/04/2013. ISSN 1520-5215

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

**Índice de impacto:** 2.771

**Revista dentro del 25%:** No

**Posición de publicación:** 50

**Num. revistas en cat.:** 135

- 58** Patricia Écija; Emilio J Cocinero; Alberto Lesarri; José A Fernández; Walther Caminati; Fernando Castaño. Rotational spectroscopy of antipyretics: conformation, structure, and internal dynamics of phenazone. *Journal of Chemical Physics*. 138 - 11, pp. 114304 - 114311. Royal Society of Chemistry, 21/03/2013. ISSN 1089-7690

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

**Índice de impacto:** 3.164

**Revista dentro del 25%:** Si

**Posición de publicación:** 8

**Num. revistas en cat.:** 34

- 59** Jean Demaison; Michaela K Jahn; Emilio J Cocinero; Alberto Lesarri; Jens-Uwe Grabow; Jean-Claude Guillemin; Heinz Dieter Rudolph. Accurate semiexperimental structure of 1,3,4-oxadiazole by the mixed estimation method. *The Journal of Physical Chemistry A*. 117 - 10, pp. 2278 - 2362. American Chemical Society, 14/03/2013. ISSN 1520-5215

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

**Índice de impacto:** 2.771

**Revista dentro del 25%:** No

**Posición de publicación:** 50

**Num. revistas en cat.:** 135



- 60** Emilio J Cocinero; Alberto Lesarri; Patricia Écija; Álvaro Cimas; Benjamin G Davis; Francisco J Basterretxea; José A Fernández; Fernando Castaño. Free fructose is conformationally locked. *Journal of the American Chemical Society*. 135 - 7, pp. 2845 - 2897. American Chemical Society, 20/02/2013. ISSN 1520-5126  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY  
**Índice de impacto:** 10.677 **Revista dentro del 25%:** Si  
**Posición de publicación:** 11 **Num. revistas en cat.:** 152
- 61** Pierre Carcabal; Emilio J. Cocinero; John P. Simons. Binding energies of micro-hydrated carbohydrates: measurements and interpretation. *Chemical Science*. 4, pp. 1830 - 1836. The Royal Society of Chemistry, 11/02/2013. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/C3SC50135C>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY  
**Índice de impacto:** 8.314 **Revista dentro del 25%:** Si  
**Posición de publicación:** 14 **Num. revistas en cat.:** 152
- 62** Luca Evangelisti; Pablo Écija; Emilio J. Cocinero; Fernando Castaño; Alberto Lesarri; Walther Caminati; R. Meyer. Proton tunneling in heterodimers of carboxylic acids: A rotational study of the benzoic acid-formic acid bi-molecule. *Journal of Physical Chemistry Letters*. American Chemical Society, 04/12/2012.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Índice de impacto:** 6.213 **Revista dentro del 25%:** Si  
**Posición de publicación:** 15 **Num. revistas en cat.:** 135
- 63** Jean Demaison; Norman C. Craig; Emilio J. Cocinero; Jens-Uwe Grabow; Alberto Lesarri; Heinz Dieter Rudolph. Semiexperimental Equilibrium Structures for the Equatorial Conformers of N-Methylpiperidone and Tropinone by the Mixed Estimation Method. *The Journal of Physical Chemistry A*. 116 - 34, pp. 8684 - 8692. American Chemical Society, 03/12/2012.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Índice de impacto:** 2.946 **Revista dentro del 25%:** No  
**Posición de publicación:** 50 **Num. revistas en cat.:** 135
- 64** Íker León; Emilio J. Cocinero; Anouk M. Rijs; Judith Millán; Eduardo Alonso; Alberto Lesarri; José A. Fernández. Formation of water polyhedrons in the hydration of propofol. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 15, pp. 568 - 575. Royal Society of Chemistry, 08/11/2012.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Índice de impacto:** 3.829 **Revista dentro del 25%:** Si  
**Posición de publicación:** 32 **Num. revistas en cat.:** 135
- 65** Patricia Écija; Francisco J. Basterretxea; Alberto Lesarri; Judith Millán; Fernando Castaño; Emilio J. Cocinero. Single hydration of the peptide bond: the case of Vince lactam. *The Journal of Physical Chemistry A*. 116 - 41, pp. 10099 - 10106. American Chemical Society, 18/10/2012.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Documento o Informe científico-técnico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL



**Índice de impacto:** 2.771  
**Posición de publicación:** 50

**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 135

- 66** Íker León; Emilio J. Cocinero; Judith Millán; Anouk M. Rijs; Imanol Usabiaga; Alberto Lesarri; Fernando Castaño; José A. Fernández. A Combined Spectroscopic and Theoretical Study of propofol•(H<sub>2</sub>O)<sub>3</sub>. Journal of Chemical Physics. 137 - 7, pp. 074303/1 - 074303/9. American Institute of Physics, 21/08/2012.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

**Índice de impacto:** 3.333

**Revista dentro del 25%:** Si

**Posición de publicación:** 8

**Num. revistas en cat.:** 34

- 67** Iker León; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Fernando Castaño; José A. Fernández. A Spectroscopic Approach to the Solvation of Anesthetics in Jets: Propofol(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>, n = 4–6. The Journal of Physical Chemistry A. 116 - 36, pp. 8934 - 8941. American Chemical Society, 03/08/2012. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp305795u>>.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

**Índice de impacto:** 2.771

**Revista dentro del 25%:** No

**Posición de publicación:** 50

**Num. revistas en cat.:** 135

- 68** Íker León; Judith Millán; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Fernando Castaño; José A. Fernández. Mimicking Anaesthetic-Receptor Interaction in Jets: a Combined Spectroscopic and Computational study of Propofol-Phenol. Physical Chemistry Chemical Physics. 14 - 25, pp. 8956 - 8963. Royal Society of Chemistry, 07/07/2012.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

**Índice de impacto:** 3.829

**Revista dentro del 25%:** Si

**Posición de publicación:** 32

**Num. revistas en cat.:** 135

- 69** Íker León; Emilio J. Cocinero; Judith Millán; Sander Jæq; Anouk M. Rijs; Alberto Lesarri; Fernando Castaño; José A. Fernández. Exploring Microsolvation of the Anesthetic Propofol. Physical Chemistry Chemical Physics. 14 - 13, pp. 4398 - 4409. Royal Society of Chemistry, 07/04/2012.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

**Índice de impacto:** 3.573

**Revista dentro del 25%:** Si

**Posición de publicación:** 32

**Num. revistas en cat.:** 135

**Resultados relevantes:** Editor's choice

- 70** Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Patricia Écija; Francisco J. Basterretxea; Jens-Uwe Grabow; José A. Fernández; Fernando Castaño. Ribose Found in the Gas Phase. Angewandte Chemie International Edition. 51 - 13, pp. 3119 - 3124. Wiley-V C H Verlag GmbH, 26/03/2012.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Revista

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

**Índice de impacto:** 13.455

**Revista dentro del 25%:** Si

**Posición de publicación:** 7

**Num. revistas en cat.:** 152

**Resultados relevantes:** Journal inside cover. Hot paper

**Reseñas en revistas:** 5



- 71** Nitzan Mayorkas; Svemir Rudic; Emilio J. Cocinero; Benjamin G. Davis; John P. Simons. Carbohydrate Hydration: Heavy Water Complexes of Glucose, Galactose, Fucose and Xylose. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 13 - 41, pp. 18671 - 18678. Royal Society of Chemistry, 07/11/2011.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Índice de impacto:** 3.573 **Revista dentro del 25%:** No  
**Posición de publicación:** 34 **Num. revistas en cat.:** 127
- 72** Madeleine Pincu; Emilio J. Cocinero; Nitzan Mayorkas; Brina Brauer; Benjamin G. Davis; R. Benny Gerber; John P. Simons. Isotopic hydration of cellobiose: vibrational spectroscopy and dynamical simulations. *The Journal of Physical Chemistry A*. 115 - 34, pp. 9498 - 9509. American Chemical Society, 01/09/2011.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Índice de impacto:** 2.946 **Revista dentro del 25%:** No  
**Posición de publicación:** 46 **Num. revistas en cat.:** 134
- 73** Luca Evangelisti; Alberto Lesarri; Michaela K. Jahn; Emilio J. Cocinero; Walther Caminati; Jens-Uwe Grabow. N-Methyl Inversion and Structure of 6-Membered Heterocyclic Rings: Rotational Spectrum 1-Methyl-4-Piperidone. *The Journal of Physical Chemistry A*. 115 - 34, pp. 9545 - 9551. American Chemical Society, 01/09/2011.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Documento o Informe científico-técnico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Índice de impacto:** 2.946 **Revista dentro del 25%:** No  
**Posición de publicación:** 46 **Num. revistas en cat.:** 134
- 74** Emilio J. Cocinero; Francisco J. Basterretxea; Patricia Écija; Alberto Lesarri; José A. Fernández; Fernando Castaño. Conformational behaviour, hydrogen bond competition and intramolecular dynamics in vanillin derivatives: acetovanillone and 6-hydroxy-3-methoxyacetophenone. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 13 - 29, pp. 13310 - 13318. Royal Society of Chemistry, 07/08/2011.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Índice de impacto:** 3.573 **Revista dentro del 25%:** No  
**Posición de publicación:** 34 **Num. revistas en cat.:** 127
- 75** Luca Evangelisti; Gang Feng; Patricia Écija; Emilio J. Cocinero; Fernando Castaño; Walther Caminati. Halogen Bond and Internal Dynamics in CF<sub>3</sub>Cl-H<sub>2</sub>O. *Angewandte Chemie International Edition*. 123 - 34, pp. 7953 - 7956. Wiley-V C H Verlag GmbH, 07/07/2011.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY  
**Índice de impacto:** 13.455 **Revista dentro del 25%:** Si  
**Posición de publicación:** 7 **Num. revistas en cat.:** 152
- 76** Patricia Écija; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Judith Millán; Francisco Basterretxea; José A. Fernández; Fernando Castaño. Discriminating the Structure of Exo-2-Aminonorborene Using Nuclear Quadrupole Coupling Interactions. *Journal of Chemical Physics*. 134 - 16, pp. 164311 - 164318. American Institute of Physics, 28/04/2011.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)



**Índice de impacto:** 3.333  
**Posición de publicación:** 7

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 33

- 77** Emilio J. Cocinero; Pierre Çarcabal; Timothy D. Vaden; Benjamin G. Davis; John P. Simons. Exploring carbohydrate-peptide interactions in the gas phase: Structure and selectivity in complexes of pyranosides with N-acetylphenylalanine methylamide. *Journal of the American Chemical Society*. 133 - 12, pp. 4548 - 4557. American Chemical Society, 04/03/2011.

**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 154

**Índice de impacto:** 9.907  
**Posición de publicación:** 11

- 78** Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Patricia Écija; Francisco Basterretxea; José A. Fernández; Fernando Castaño. Competing hydrogen bonding in methoxyphenols: The rotational spectrum of o-vanillin. *Journal of Molecular Spectroscopy*. 267, pp. 112 - 117. Academic Press Inc. Elsevier Science, 26/02/2011.

**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 33

**Índice de impacto:** 1.512  
**Posición de publicación:** 22

- 79** Emilio J. Cocinero; Pierre Çarcabal; Timothy D. Vaden; John P. Simons; Benjamin G. Davis. Sensing the anomeric effect in a solvent-free environment. *Nature*. 469, pp. 76 - 80. Nature Publishing Group, 05/01/2011.

**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - MULTIDISCIPLINARY SCIENCES

**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 57

**Índice de impacto:** 36.280  
**Posición de publicación:** 1

**Resultados relevantes:** This communication was considered the best scientific publication in 2011 conducted by a Spanish young researcher in any area of Chemistry.

- 80** Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Patricia Écija; Jens-Uwe Grabow; José A. Fernández; Fernando Castaño. Conformational equilibria in Vanillin and Ethylvanillin. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 12 - 39, pp. 12486 - 12493. Royal Society of Chemistry, 21/10/2010.

**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.453  
**Posición de publicación:** 34

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 127

- 81** Alberto Lesarri; Emilio J. Cocinero; Luca Evangelisti; Richard D. Suenram; Walther Caminati; Jens-Uwe Grabow. The Conformational Landscape of Nicotinoids: Solving the Conformational Disparity of Anabasine. *Chemistry – A European Journal*. 16 - 33, pp. 10214 - 10219. Wiley-V C H Verlag GmbH, 03/09/2010.

**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

**Revista dentro del 25%:** Si

**Índice de impacto:** 5.476

**Posición de publicación:** 18

**Num. revistas en cat.:** 144

- 82** Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Patricia Écija; Jens-Uwe Grabow; José A. Fernández; Fernando Castaño. N-Methyl Stereochemistry in Tropinone: The conformational flexibility of the tropane motif. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 12 - 23, pp. 6076 - 6083. Royal Society of Chemistry, 19/04/2010.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Índice de impacto:** 3.453 **Revista dentro del 25%:** No  
**Posición de publicación:** 34 **Num. revistas en cat.:** 127
- 83** Emilio J. Cocinero; E. Cristina Stanca-Kaposta; Mark Dethlefsen; Bo Liu; David P. Gamblin; Benjamin G. Davis; John P. Simons. Hydration of sugars in the gas phase: regioselectivity and conformational choice in N-acetyl glucosamine and glucose. *Chemistry – A European Journal*. 15 - 48, pp. 13427 - 13434. Wiley-V C H Verlag GmbH, 14/12/2009.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Documento o Informe científico-técnico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY  
**Índice de impacto:** 5.382 **Revista dentro del 25%:** Si  
**Posición de publicación:** 16 **Num. revistas en cat.:** 138
- 84** Edurne Aguado; Iker Leon; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Jose A. Fernandez; Fernando Castano. Molecular recognition in the gas phase: benzocaine-phenol as a model of anaesthetic-receptor interaction. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 11, pp. 11608 - 11616. The Royal Society of Chemistry, 06/11/2009. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/B915325J>>.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Índice de impacto:** 4.116 **Revista dentro del 25%:** Si  
**Posición de publicación:** 24 **Num. revistas en cat.:** 121
- 85** Emilio J. Cocinero; David P. Gamblin; Benjamin G. Davis; John P. Simons. The building blocks of cellulose: the intrinsic conformational structures of cellobiose, its epimer, lactose, and their singly hydrated complexes. *Journal of the American Chemical Society*. 131 - 31, pp. 11117 - 11123. American Chemical Society, 20/07/2009.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY  
**Índice de impacto:** 8.580 **Num. revistas en cat.:** 127  
**Posición de publicación:** 7
- 86** Zheng Su; Beatrice Wagner; Emilio J. Cocinero; Beat Ernst; John P. Simons. The intrinsic conformation of a Lewis antigen: The Lewis x trisaccharide. *Chemical Physics Letters*. 477, pp. 365 - 368. Elsevier Science BV, 03/07/2009.  
**Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Índice de impacto:** 2.291 **Revista dentro del 25%:** No  
**Posición de publicación:** 51 **Num. revistas en cat.:** 121



- 87** John P. Simons; Benjamin G. Davis; Emilio J. Cocinero; David P. Gamblin; E. Cristina Stanca-Kaposta. Conformational change and selectivity in explicitly hydrated carbohydrates. *Tetrahedron-Asymmetry*. 471, pp. 718 - 722. Pergamon-Elsevier Science Ltd., 04/05/2009.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 2.625  
**Posición de publicación:** 13  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR  
**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 44
- 88** Zheng Su; Emilio J. Cocinero; E. Cristina Stanca-Kaposta; Benjamin G. Davis; John P. Simons. Carbohydrate-aromatic interactions: a computational and IR spectroscopic investigation of the complex, methyl alfa-L-fuco-pyranoside+toluene, isolated in the gas phase. *Chemical Physics Letters*. 471, pp. 17 - 21. Elsevier Science BV, 20/02/2009.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 2.291  
**Posición de publicación:** 51  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 121
- 89** Emilio J. Cocinero; E. Cristina Stanca-Kaposta; David P. Gamblin; Benjamin G. Davis; John P. Simons. Peptide secondary structures in the gas phase: the consensus motif of N-linked glycoproteins. *Journal of the American Chemical Society*. 131 - 3, pp. 1282 - 1287. American Chemical Society, 28/01/2009.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 8.580  
**Posición de publicación:** 7  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 127
- 90** John P. Simons; E. Cristina Stanca-Kaposta; Emilio J. Cocinero; B. Liu; Benjamin G. Davis; David P. Gamblin; Romano T. Kroemer. Probing the glycosidic linkage: secondary structures in the gas phase. *Physica Scripta*. 78 - 5, pp. 058124/1 - 058124/7. IOP Publishing Ltd., 05/11/2008.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 0.970  
**Posición de publicación:** 36  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - PHYSICS, MULTIDISCIPLINARY  
**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 68  
**Resultados relevantes:** Invited Journal
- 91** Emilio J. Cocinero; E. Cristina Stanca-Kaposta; Eoin M. Scanlan; David P. Gamblin; Benjamin G. Davis; John P. Simons. Conformational choice and selectivity in singly and multiply hydrated monosaccharides in the gas phase. *Chemistry – A European Journal*. 14 - 29, pp. 8947 - 8955. Wiley-V C H Verlag GmbH, 10/10/2008.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 5.454  
**Posición de publicación:** 12  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 127
- 92** E. Cristina Stanca-Kaposta; David P. Gamblin; Emilio J. Cocinero; Jann Frey; Romano T. Kroemer; Antony J. Fairbanks; Benjamin G. Davis; John P. Simons. Solvent Interactions and Conformational Choice in a Core N-Glycan Segment: Gas Phase Conformation of the Central, Branching Trimannose Unit and its Singly Hydrated



Complex. Journal of the American Chemical Society. 130 - 32, pp. 10691 - 10696. American Chemical Society, 17/07/2008.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 8.091

**Posición de publicación:** 7

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

**Revista dentro del 25%:** Si

**Num. revistas en cat.:** 127

- 93** Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Jens-Uwe Grabow; Juan C. López; José L. Alonso. The shape of leucine in the gas phase. ChemPhysChem. 8 - 4, pp. 599 - 604. Wiley-V C H Verlag GmbH, 12/03/2007.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 3.502

**Posición de publicación:** 25

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

**Revista dentro del 25%:** Si

**Num. revistas en cat.:** 113

- 94** Emilio J. Cocinero; Pablo Villanueva; Alberto Lesarri; María E. Sanz; Susana Blanco; Santiago Mata; Juan C. López; José L. Alonso. The shape of neutral sarcosine in gas phase. Chemical Physics Letters. 435 - 4-6, pp. 336 - 341. Elsevier Science BV, 19/02/2007.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 2.207

**Posición de publicación:** 47

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

**Revista dentro del 25%:** No

**Num. revistas en cat.:** 113

- 95** Deike Banser; Jens-Uwe Grabow; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; José L. Alonso. The pure rotational spectrum of TeSe: rotational parameters, Born-Oppenheimer break down corrections and hyperfine constants. Journal of Molecular Structure. 795 - 1-3, pp. 163 - 172. Elsevier Science BV, 21/08/2006.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 1.495

**Posición de publicación:** 66

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

**Revista dentro del 25%:** No

**Num. revistas en cat.:** 113

- 96** Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; María E. Sanz; Juan C. López; José L. Alonso. Conformations of alfa-aminobutyric acid in gas-phase. ChemPhysChem. 7 - 7, pp. 1481 - 1487. Wiley-V C H Verlag GmbH, 17/07/2006.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 3.449

**Posición de publicación:** 25

**Tipo de soporte:** Revista

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

**Revista dentro del 25%:** Si

**Num. revistas en cat.:** 113

- 97** José L. Alonso; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; María E. Sanz; Juan C. López. The glycine-water complex. Angewandte Chemie International Edition. 45 - 21, pp. 3471 - 3474. Wiley-V C H Verlag GmbH, 03/05/2006.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 10.232

**Posición de publicación:** 4

**Tipo de soporte:** Documento o Informe científico-técnico

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

**Revista dentro del 25%:** Si

**Num. revistas en cat.:** 127

**Resultados relevantes:** Paper qualified as VIP (Very Important Paper) by the Journal. Journal Cover



- 98** Deike Banser; Melanie Schnell; Jens-Uwe Grabow; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; José L. Alonso. The internuclear potential, electronic structure, and chemical bond of tellurium selenide. *Angewandte Chemie International Edition*. 44 - 39, pp. 6311 - 6315. Wiley-V C H Verlag GmbH, 07/10/2005.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 9.596  
**Posición de publicación:** 4  
**Resultados relevantes:** Paper qualified as VIP (Very Important Paper) by the Journal  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 127
- 99** Alberto Lesarri; Raquel Sánchez; Emilio J. Cocinero; Juan C. López; José L. Alonso. Coded amino acids in the gas phase: the shape of isoleucine. *Journal of the American Chemical Society*. 127 - 37, pp. 12952 - 12956. American Chemical Society, 21/09/2005.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 7.419  
**Posición de publicación:** 7  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 127
- 100** Alberto Lesarri; Emilio J. Cocinero; Juan C. López; José L. Alonso. Gas-phase structure of N,N-dimethylglycine. *ChemPhysChem*. 6 - 8, pp. 1559 - 1566. Wiley-V C H Verlag GmbH, 06/07/2005.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 3.607  
**Posición de publicación:** 25  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 113
- 101** Alberto Lesarri; Emilio J. Cocinero; Juan C. López; José L. Alonso. The shape of 4(S)- and 4(R)-hydroxyproline in gas phase. *Journal of the American Chemical Society*. 127 - 8, pp. 2572 - 2579. American Chemical Society, 02/03/2005.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 7.419  
**Posición de publicación:** 7  
**Tipo de soporte:** Documento o Informe científico-técnico  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY  
**Revista dentro del 25%:** Si  
**Num. revistas en cat.:** 127  
**Publicación relevante:** No
- 102** Emilio J. Cocinero; Raquel Sánchez; Alberto Lesarri; Juan C. López; José L. Alonso. Weak hydrogen bonds C-H...S and C-H...F-C in the thirane- trifluoromethane dimer. *Chemical Physics Letters*. 402 - 1-3, pp. 4 - 10. Elsevier Science BV, 24/01/2005.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Fuente de impacto:** WOS (JCR)  
**Índice de impacto:** 2.438  
**Posición de publicación:** 47  
**Tipo de soporte:** Revista  
**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL  
**Revista dentro del 25%:** No  
**Num. revistas en cat.:** 113
- 103** Alberto Lesarri; Emilio J. Cocinero; Juan C. López; José L. Alonso. The shape of neutral valine. *Angewandte Chemie International Edition*. 43 - 5, pp. 605 - 610. Wiley-V C H Verlag GmbH, 21/01/2004.  
**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Tipo de soporte:** Revista



**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 9.161

**Posición de publicación:** 4

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

**Revista dentro del 25%:** Si

**Num. revistas en cat.:** 137

- 104** Alberto Lesarri; Santiago Mata; Emilio J. Cocinero; Susana Blanco; Juan C. López; José L. Alonso. The structure of neutral proline. *Angewandte Chemie International Edition*. 41 - 24, pp. 4673 - 4676. Wiley-V C H Verlag GmbH, 12/12/2002.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Tipo de soporte:** Documento o Informe científico-técnico

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

**Índice de impacto:** 7.671

**Revista dentro del 25%:** Si

**Posición de publicación:** 4

**Num. revistas en cat.:** 127

- 105** J. P. Simons; N. Mayorkas; B. G. Davis; E. J. Cocinero; M. Pincu; R. B. Gerber; B. Brauer. Isotopic hydration of cellobiose: vibrational spectroscopy and dynamical simulations. *Annual Report, Central Laser Facility, Rutherford Appleton Laboratory*. pp. 60. 10/2011.

**Tipo de producción:** Capítulo de libro

**Tipo de soporte:** Documento o Informe científico-técnico

- 106** J. P. Simons; Z. Su; E. J. Cocinero; B. Ernst; B. Wagner. Antigens laid bare: The intrinsic conformation of Lewis. *Annual Report, Central Laser Facility, Rutherford Appleton Laboratory*. pp. 204 - 205. 09/2010.

**Tipo de producción:** Capítulo de libro

**Tipo de soporte:** Documento o Informe científico-técnico

- 107** Z. Su; E. J. Cocinero; J. P. Simons; E. C. Stanca-Kaposta; B. G. Davis. Carbohydrate molecular recognition: probing CH-pi interactions. *Annual Report, Central Laser Facility, Rutherford Appleton Laboratory*. pp. 206 - 207. 09/2010.

**Tipo de producción:** Capítulo de libro

**Tipo de soporte:** Documento o Informe científico-técnico

- 108** E. J. Cocinero; J. P. Simons; E. C. Stanca-Kaposta; B. G. Davis; D. P. Gamblin. Hydrophilic and Hydrophobic Carbohydrate Interactions. *Annual Report, Central Laser Facility, Rutherford Appleton Laboratory*. pp. 187 - 189. 08/2009.

**Tipo de producción:** Capítulo de libro

**Tipo de soporte:** Documento o Informe científico-técnico

- 109** E. C. Stanca-Kaposta; B. Liu; E. J. Cocinero; T. D. Vaden; J. Frey; J. P. Simons; L. C. Snoek. Towards the elucidation of the 3D structure of N-linked glycoproteins: does rigidity play an important role?. *Annual Report, Central Laser Facility, Rutherford Appleton Laboratory*. pp. 143 - 146. 06/2007.

**Tipo de producción:** Capítulo de libro

**Tipo de soporte:** Documento o Informe científico-técnico

- 110** Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri. ¡Disolvente fuera!: azúcares en fase gas. *Anales de Química*. 109, pp. 258 - 267. Real Sociedad Española de Química, 12/2013.

**Tipo de soporte:** Revista



## Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **Título del trabajo:** Conformational analysis of 2-deoxyribose and D-lyxose: from gas phase to solution studies  
**Nombre del congreso:** Workshop R. Woods  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Bilbao, España  
**Fecha de celebración:** 02/12/2019  
**Fecha de finalización:** 03/12/2019  
M. Parra; E. J. Cocinero.
- 2** **Título del trabajo:** Conformational landscape of glucuronic and galacturonic acids  
**Nombre del congreso:** Workshop R. Woods  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Bilbao, España  
**Fecha de celebración:** 02/12/2019  
**Fecha de finalización:** 03/12/2019  
A. Insausti; E. J. Cocinero.
- 3** **Título del trabajo:** Impact of the OH-to-F replacements in monosaccharides by high resolution microwave spectroscopy  
**Nombre del congreso:** Workshop R. Woods  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Bilbao, España  
**Fecha de celebración:** 02/12/2019  
**Fecha de finalización:** 03/12/2019  
E. R. Alonso; E. J. Cocinero.
- 4** **Título del trabajo:** Weak intramolecular and intermolecular interactions of sugars in gas phase  
**Nombre del congreso:** Workshop R. Woods  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Bilbao, España  
**Fecha de celebración:** 02/12/2019  
**Fecha de finalización:** 03/12/2019  
I. Usabiaga; E. J. Cocinero.
- 5** **Título del trabajo:** IMPACT OF THE OH-TO-F REPLACEMENTS IN MONOSACCHARIDES BY HIGH RESOLUTION MICROWAVE SPECTROSCOPY (O17)  
**Nombre del congreso:** XVI SIMPOSIO JÓVENES INVESTIGADORES QUÍMICOS  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Valencia, España  
**Fecha de celebración:** 04/11/2019  
**Fecha de finalización:** 07/11/2019



E. R. Alonso; P. J. Prieto; C. Calabrese; J. Mestre; A. Insausti; M. Escudero-Caso; M. Salvadó; F. J. Basterretxea; S. Castellón; O. Boutureira; E. J. Cocinero.

**6 Título del trabajo:** LARGE CLUSTERS AND SMALL BINDING ENERGIES: A CHALLENGE OVERCOME BY ROTATIONAL SPECTROSCOPY. A POWERFUL TOOL FOR NON-COVALENT INTERACTIONS (O22)

**Nombre del congreso:** XVI SIMPOSIO JÓVENES INVESTIGADORES QUÍMICOS

**Ámbito geográfico:** Nacional

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Ciudad de celebración:** Valencia, España

**Fecha de celebración:** 04/11/2019

**Fecha de finalización:** 07/11/2019

C. Calabrese; L. Evangelisti; E. R. Alonso; A. Insausti; B. Pate; E. J. Cocinero.

**7 Título del trabajo:** Unravelling bio-structures by high resolution spectroscopies and applications

**Nombre del congreso:** Seminario en el CinQuima

**Tipo evento:** Seminario

**Ámbito geográfico:** Nacional

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

**Ciudad de celebración:** Valladolid, España

**Fecha de celebración:** 11/10/2019

**Fecha de finalización:** 11/10/2019

E. J. Cocinero.

**8 Título del trabajo:** Unravelling bio-structures and applications by high resolution spectroscopies: Microwave and Laser spectroscopies

**Nombre del congreso:** Seminario en el Centro de Astrobiología

**Tipo evento:** Seminario

**Ámbito geográfico:** Nacional

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

**Ciudad de celebración:** Madrid, España

**Fecha de celebración:** 04/10/2019

**Fecha de finalización:** 04/10/2019

E. J. Cocinero.

**9 Título del trabajo:** ANALYSIS OF THE ROTATIONAL SPECTRUM OF LARGE DIFLUOROMETHANE CLUSTERS (TC02)

**Nombre del congreso:** 74st International Symposium on Molecular Spectroscopy

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Ciudad de celebración:** Champaign-Urbana, Estados Unidos de América

**Fecha de celebración:** 17/06/2019

**Fecha de finalización:** 21/06/2016

L. Evangelisti; A. Fiorini; L. Zerbini; L. Foschini; C. Calabrese; E. J. Cocinero; B. Temelso; G. C. Shields; B. Pate.

**10 Título del trabajo:** Accurate DNA sugar structures unraveled by rotational spectroscopy

**Nombre del congreso:** XXXVII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** San Sebastián, España

**Fecha de celebración:** 26/05/2019

**Fecha de finalización:** 30/05/2019

A. Insausti; C. Calabrese; I. Uriarte; M. Parra; O. Boutureira; B. G. Davis; F. Corzana; E. J. Cocinero.



- 11** **Título del trabajo:** Elucidating structures of biomolecules through high-resolution spectroscopies  
**Nombre del congreso:** XXXVII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** San Sebastián, España  
**Fecha de celebración:** 26/05/2019  
**Fecha de finalización:** 30/05/2019  
A. Insausti; C. Calabrese; I. Usabiaga; I. A. Bermejo; B. G. Davis; F. Corzana; E. J. Cocinero.
- 12** **Título del trabajo:** High Resolution Spectroscopy in Modern Chemistry  
**Nombre del congreso:** Seminario en el ICMol  
**Tipo evento:** Seminario **Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Valencia, España  
**Fecha de celebración:** 11/05/2019  
**Fecha de finalización:** 11/05/2019  
E. J. Cocinero.
- 13** **Título del trabajo:** Unravelling bio-structures and applications: Microwave and Laser spectroscopies  
**Nombre del congreso:** Seminario en la Universidad de Bolonia  
**Tipo evento:** Seminario **Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Bolonia, Italia  
**Fecha de celebración:** 09/04/2019  
**Fecha de finalización:** 09/04/2019  
E. J. Cocinero.
- 14** **Título del trabajo:** Elucidating bio-structures and applications: Microwave and Laser spectroscopies  
**Nombre del congreso:** Molecular Interactions from Biology to Astrochemistry  
**Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Plenaria  
**Ciudad de celebración:** Newcastle, Reino Unido  
**Fecha de celebración:** 02/04/2019  
**Fecha de finalización:** 02/04/2019  
E. J. Cocinero.
- 15** **Título del trabajo:** Conformational analysis of 2-deoxyribose: from gas phase to solution  
**Nombre del congreso:** 2nd Glycobasque Meeting  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Bilbao, España  
**Fecha de celebración:** 22/03/2019  
**Fecha de finalización:** 22/03/2019  
A. Insausti; E. J. Cocinero.
- 16** **Título del trabajo:** UNRAVELING STRUCTURES OF CARBOHYDRATES THROUGH HIGH-RESOLUTION SPECTROSCOPIES  
**Nombre del congreso:** 2nd Glycobasque Meeting  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote



**Ciudad de celebración:** Bilbao, España  
**Fecha de celebración:** 22/03/2019  
**Fecha de finalización:** 22/03/2019  
E. J. Cocinero.

**17 Título del trabajo:** Elucidating bio-structures and applications : Microwave and Laser spectroscopies  
**Nombre del congreso:** Seminario en el Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay  
**Tipo evento:** Seminario **Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Paris, Francia  
**Fecha de celebración:** 02/10/2018  
**Fecha de finalización:** 02/10/2018  
E. J. Cocinero.

**18 Título del trabajo:** Elucidating bio-structures and applications: Microwave and Laser spectroscopies  
**Nombre del congreso:** Seminario en el Universidad de Kaisernlauternrn  
**Tipo evento:** Seminario **Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Kaisernlauternrn, Alemania  
**Fecha de celebración:** 26/09/2018  
**Fecha de finalización:** 26/09/2018  
E. J. Cocinero.

**19 Título del trabajo:** DNA sugars: in the gas phase and in solution  
**Nombre del congreso:** The 25th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Bilbao, España  
**Fecha de celebración:** 03/09/2018  
**Fecha de finalización:** 07/09/2018  
I. Uriarte; C. Calabrese; A. Insausti; M. Vallejo-López; F. Corzana; B. G. Davis; E. J. Cocinero.

**20 Título del trabajo:** Self-aggregation process in CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>: large homoclusters studied by rotational spectroscopy (B7.2)  
**Nombre del congreso:** The 25th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Bilbao, España  
**Fecha de celebración:** 03/09/2018  
**Fecha de finalización:** 07/09/2018  
C. Calabrese; L. Evangelisti; I. Uriarte; B. Pate; E. J. Cocinero.

**21 Título del trabajo:** Solving discrepancies between theory and experiment: Methyl Jasmonate and Zingerone (B5.2)  
**Nombre del congreso:** The 25th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Bilbao, España  
**Fecha de celebración:** 03/09/2018  
**Fecha de finalización:** 07/09/2018  
A. Jabri; I. Uriarte; H. Mouhib; I. Kleiner; A. Insausti; I. Alkorta; E. J. Cocinero.



- 22 Título del trabajo:** Spectroscopy Group at the University of the Basque Country (P1.5 y P2.5)  
**Nombre del congreso:** The 25th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Bilbao, España  
**Fecha de celebración:** 03/09/2018  
**Fecha de finalización:** 07/09/2018  
C. Calabrese; A. Insausti; I. Uriarte; C. Pérez; M. Parra; F. J. Basterretxea; E. J. Cocinero.
- 23 Título del trabajo:** Elucidating structures of biomolecules through high-resolution spectroscopies (Hot Topic-10)  
**Nombre del congreso:** The 10th Isolated Biomolecules and Biomolecular Interactions Conference  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Texel, Holanda  
**Fecha de celebración:** 08/04/2018  
**Fecha de finalización:** 13/04/2018  
I. Usabiaga; I. A. Bermejo; J. A. Fernández; F. Corzana; E. J. Cocinero.
- 24 Título del trabajo:** Microwave structure of biological sugars  
**Nombre del congreso:** X Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular (J2IFAM)  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Barcelona, España  
**Fecha de celebración:** 03/04/2018  
**Fecha de finalización:** 06/04/2018  
M. Vallejo-López; I. Uriarte; F. J. Basterretxea; E. J. Cocinero.
- 25 Título del trabajo:** Advanced spectroscopic and magnetic techniques in molecular and nanoscale research  
**Nombre del congreso:** VI Jornadas de investigación de la facultad de ciencia y tecnología  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Bilbao, España  
**Fecha de celebración:** 14/03/2018  
**Fecha de finalización:** 15/03/2018  
J. Garate; I. Uriarte; L. Martínez; I. Lamas; A. Camiruaga; I. Montoya; I. Aizpitarte; R. Fernández; C. Calabrese; I. Galetich; J. A. Fernández; A. Longarte; C. Redondo; R. Morales; E. J. Cocinero; F. J. Basterretxea.
- 26 Título del trabajo:** HIGH CONDUCTANCE VALUES IN  $\pi$ -FOLDED MOLECULAR JUNCTIONS  
**Nombre del congreso:** XIV Simposio de Investigadores Jóvenes  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Badajoz, España  
**Fecha de celebración:** 07/11/2017  
**Fecha de finalización:** 10/11/2017  
M. Carini; M. P. Ruíz; I. Usabiaga; J. A. Fernández; E. J. Cocinero; M. Melle-Franco; I. Diez-Pérez; A. Mateo-Alonso.



- 27** **Título del trabajo:** Spectroscopy of biomolecules in Modern Chemistry  
**Nombre del congreso:** XIV Simposio de Investigadores Jóvenes  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Badajoz, España  
**Fecha de celebración:** 07/11/2017  
**Fecha de finalización:** 10/11/2017  
E. J. Cocinero; I. Uriarte; I. Usabiaga; M. Vallejo-López; F. Corzana; J. A. Fernández; F. J. Basterretxea.
- 28** **Título del trabajo:** Spectroscopy of biomolecules in modern chemistry (S6-OC07)  
**Nombre del congreso:** XXXVI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Sietges, España  
**Fecha de celebración:** 25/06/2017  
**Fecha de finalización:** 29/06/2017  
E. J. Cocinero; I. Uriarte; M. Vallejo-López; J. A. Fernández; F. J. Basterretxea.
- 29** **Título del trabajo:** Structures of biomolecules by microwave and laser spectroscopies (S14-OC03).  
**Nombre del congreso:** XXXVI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Sietges, España  
**Fecha de celebración:** 25/06/2017  
**Fecha de finalización:** 29/06/2017  
E. J. Cocinero; I. Uriarte; M. Vallejo-López; J. A. Fernández; F. J. Basterretxea.
- 30** **Título del trabajo:** Conformational study of DNA sugars: from the gas phase to solution (WC04)  
**Nombre del congreso:** 72nd International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Champaign-Urbana, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 19/06/2017  
**Fecha de finalización:** 23/06/2017  
I. Uriarte; M. Vallejo-López; E. J. Cocinero; F. Corzana; B. G. Davis.
- 31** **Título del trabajo:** Large oligomers stabilized by WHB networks: pentamers of difluoromethane and its water clusters (TH04)  
**Nombre del congreso:** 72nd International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Champaign-Urbana, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 19/06/2017  
**Fecha de finalización:** 23/06/2017  
E. J. Cocinero; I. Uriarte; L. Evangelisti; C. Calabrese; G. Prampolini; I. Cacelli; B. Pate.
- 32** **Título del trabajo:** Elucidating structures of Sugars by High Resolution Spectroscopies Plenary, (Enrique Perez-Paya Prize, PL-11).  
**Nombre del congreso:** 16th Congress of Spanish Biophysical Society  
**Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Plenaria



**Ciudad de celebración:** Sevilla, España

**Fecha de celebración:** 06/06/2017

**Fecha de finalización:** 08/06/2017

E. J. Cocinero.

**33 Título del trabajo:** Elucidando estructuras de biomoléculas por espectroscopias de alta resolución

**Nombre del congreso:** Seminario en la Universidad de La Rioja

**Tipo evento:** Seminario

**Ámbito geográfico:** Nacional

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

**Ciudad de celebración:** Logroño, España

**Fecha de celebración:** 19/05/2017

**Fecha de finalización:** 19/05/2017

E. J. Cocinero.

**34 Título del trabajo:** Exploring the Interaction of Glucopyranose Anomers in Isolated Phase Using Mass-Resolves Excitation Spectroscopy

**Nombre del congreso:** XXI European Conference on the Dynamics of Molecular Systems (P-30)

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Toledo, España

**Fecha de celebración:** 11/09/2016

**Fecha de finalización:** 16/09/2016

I. Usabiaga; E. J. Cocinero; J. A. Fernández.

**35 Título del trabajo:** REMPI and IDIRS Spectroscopy of Glucose-Derivative Dimers in Gas Phase

**Nombre del congreso:** The 24th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Praga, República Checa

**Fecha de celebración:** 30/08/2016

**Fecha de finalización:** 03/09/2016

I. Usabiaga; I. León; P. F. Arnaiz; J. González; E. J. Cocinero; J. A. Fernández.

**36 Título del trabajo:** The conformational landscape of rose ketones in the gas phase

**Nombre del congreso:** The 24th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Praga, República Checa

**Fecha de celebración:** 30/08/2016

**Fecha de finalización:** 03/09/2016

I. Uriarte; C. Calabrese; D. Olivenza-León; A. Maris; S. Melandri; E. J. Cocinero.

**37 Título del trabajo:** Competition between  $\pi$  or sigma interactions in pyridine freons complexes: The rotational spectrum of pyridine-fluoromethane

**Nombre del congreso:** Symposium at NIST by post-docs, collaborators, international visitors and friends of Jon Hougen

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Ciudad de celebración:** Washington, Estados Unidos de América

**Fecha de celebración:** 27/06/2016

**Fecha de finalización:** 28/06/2016



M. Vallejo-López; L. Spada; Q. Gou; A. Lesarri; W. Caminati; E. J. Cocinero.

- 38 Título del trabajo:** The conformational landscape of ionones  
**Nombre del congreso:** Symposium at NIST by post-docs, collaborators, international visitors and friends of Jon Hougen  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Washington, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 27/06/2016  
**Fecha de finalización:** 28/06/2016  
I. Uriarte; C. Calabrese; P. Écija; A. Maris; S. Melandri; E. J. Cocinero.
- 39 Título del trabajo:** Local anesthetics in the gas-phase: the rotational spectrum of butamben and isobutamben (MJ02)  
**Nombre del congreso:** 71st International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Champaign-Urbana, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 20/06/2016  
**Fecha de finalización:** 24/06/2016  
M. Vallejo-López Cocinero; P. Écija; W. Caminati; J.-U. Grabow; A. Lesarri; E. J. Cocinero.
- 40 Título del trabajo:** N-methyl inversion in pseudo-pelletierine (MI08)  
**Nombre del congreso:** 71st International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Champaign-Urbana, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 20/06/2016  
**Fecha de finalización:** 24/06/2016  
M. Vallejo-López; P. Écija; E. J. Cocinero; A. Lesarri; F. J. Basterretxea; J. A. Fernández.
- 41 Título del trabajo:** Rotational spectroscopy of CF<sub>2</sub>CICCl<sub>3</sub> and analysis of hyperfine structure from four quadrupolar nuclei (WE06)  
**Nombre del congreso:** 71st International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Champaign-Urbana, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 20/06/2016  
**Fecha de finalización:** 24/06/2016  
Z. Kisiel; E. Białkowska-Jaworska; I. Uriarte; F. J. Basterretxea; E. J. Cocinero.
- 42 Título del trabajo:** Solving the tautomeric equilibrium of purine through the analysis of the complex hyperfine structure of the four <sup>14</sup>N nuclei (WE04)  
**Nombre del congreso:** 71st International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Champaign-Urbana, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 20/06/2016  
**Fecha de finalización:** 24/06/2016  
E. J. Cocinero; I. Uriarte; P. Écija; L. B. Favero; L. Spada; W. Caminati.



- 43** **Título del trabajo:** High resolution spectroscopy in Modern Chemistry  
**Nombre del congreso:** Seminario en el POLYMAT  
**Tipo evento:** Seminario **Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** San Sebastián, España  
**Fecha de celebración:** 18/04/2016  
**Fecha de finalización:** 18/04/2016  
E. J. Cocinero.
- 44** **Título del trabajo:** Microwave Spectroscopy: From essential sugars to Stars  
**Nombre del congreso:** V Jornadas de investigación de la facultad de ciencia y tecnología  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Bilbao, España  
**Fecha de celebración:** 06/04/2016  
**Fecha de finalización:** 07/04/2016  
M. Vallejo-López; D. Olivenza; I. Uriarte; E. J. Cocinero.
- 45** **Título del trabajo:** Structures of biomolecules and their clusters: recent news from the University of the Basque Country  
**Nombre del congreso:** Workshop on Mirror Images in Molecules: High Resolution Spectroscopy Features  
**Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Plenaria  
**Ciudad de celebración:** Bolonia, Italia  
**Fecha de celebración:** 06/04/2016  
**Fecha de finalización:** 07/04/2016  
I. Uriarte; D. Olivenza; M. Vallejo-López; E. J. Cocinero.
- 46** **Título del trabajo:** Drugs detection in gas phase: microwave study of isobutamben (CO-30)  
**Nombre del congreso:** VIII Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Valladolid, España  
**Fecha de celebración:** 24/02/2016  
**Fecha de finalización:** 26/02/2016  
M. Vallejo-López; P. Écija; A. Lesarri; E. J. Cocinero.
- 47** **Título del trabajo:** How pyridine interacts with freons:  $\pi$  or  $\sigma$  intermolecular bonds? (FP-16)  
**Nombre del congreso:** XII Simposio de Investigadores Jóvenes  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Barcelona, España  
**Fecha de celebración:** 03/11/2015  
**Fecha de finalización:** 06/11/2015  
M. Vallejo-López; Q. Gou; L. Spada; A. Lesarri; E. J. Cocinero; W. Caminati.
- 48** **Título del trabajo:** La espectroscopía de alta resolución en la química moderna (Co-6)  
**Nombre del congreso:** XII Simposio de Investigadores Jóvenes  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Barcelona, España



**Fecha de celebración:** 03/11/2015

**Fecha de finalización:** 06/11/2015

E. J. Cocinero; I. Uriarte; P. Écijha; F. J. Basterretxea; J. A. Fernández; A. Lesarri.

**49 Título del trabajo:** Glucose Clusters: Unraveling the interaction of terminal Glucoses by IR Laser spectroscopy in supersonic expansion (O8)

**Nombre del congreso:** XIII Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2015)

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Ciudad de celebración:** Aveiro, Portugal

**Fecha de celebración:** 24/09/2015

**Fecha de finalización:** 28/09/2015

I. Usabiaga; I. León; P. F. Arnaiz; J. González; E. J. Cocinero; J. A. Fernández.

**50 Título del trabajo:** What can we expect of high-resolution spectroscopies on sugars? (IL8)

**Nombre del congreso:** XIII Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics (IBER2015)

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

**Ciudad de celebración:** Aveiro, Portugal

**Fecha de celebración:** 24/09/2015

**Fecha de finalización:** 28/09/2015

E. J. Cocinero.

**51 Título del trabajo:** Conformational map of the anesthetic enflurane (B15)

**Nombre del congreso:** 24th Colloquium on High-Resolution Molecular Spectroscopy

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Dijon, Francia

**Fecha de celebración:** 24/08/2015

**Fecha de finalización:** 28/08/2015

C. Pérez; E. Caballero; A. Lesarri; E. J. Cocinero; I. Alkorta; R. D. Suenram; B. H. Pate; J.-U. Grabow.

**52 Título del trabajo:** Elucidating structures of carbohydrates by high resolution spectroscopies (M1)

**Nombre del congreso:** 24th Colloquium on High-Resolution Molecular Spectroscopy

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Tipo de participación:** Participativo - Plenaria

**Ciudad de celebración:** Dijon, Francia

**Fecha de celebración:** 24/08/2015

**Fecha de finalización:** 28/08/2015

E. J. Cocinero.

**53 Título del trabajo:** Pseudorotational landscape of seven-membered rings: the conformational flexibility of  $\epsilon$ -caprolactone (D27)

**Nombre del congreso:** 24th Colloquium on High-Resolution Molecular Spectroscopy

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Dijon, Francia

**Fecha de celebración:** 24/08/2015

**Fecha de finalización:** 28/08/2015

M. K. Jahn; D. A. Dewald; J.-U. Grabow; M. Vallejo-López; A. Lesarri; E. J. Cocinero; W. Zou; D. Cremer.



- 54** **Título del trabajo:** The intrinsic ring-puckering conformation of an isolated ribofuranose unit (Q17)  
**Nombre del congreso:** 24th Colloquium on High-Resolution Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Dijon, Francia  
**Fecha de celebración:** 24/08/2015  
**Fecha de finalización:** 28/08/2015  
P. Écija; I. Uriarte; F. J. Basterretxea; E. J. Cocinero; L. Spada; W. Caminati; G. Davis; A. Lesarri.
- 55** **Título del trabajo:** Unravelling the conformational landscape of nicotinoids: the structure of cotinine in the gas phase (D4)  
**Nombre del congreso:** 24th Colloquium on High-Resolution Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Dijon, Francia  
**Fecha de celebración:** 24/08/2015  
**Fecha de finalización:** 28/08/2015  
I. Uriarte; P. Écija; E. J. Cocinero; C. Pérez; E. Caballero-Mancebo; A. Lesarri.
- 56** **Título del trabajo:** Rotational spectroscopy of newly detected atmospheric ozone depleters: CF<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>Cl, CF<sub>3</sub>CCl<sub>3</sub>, and CF<sub>2</sub>CICCl<sub>3</sub> (RF11)  
**Nombre del congreso:** 70th International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Champaign-Urbana, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 22/06/2015  
**Fecha de finalización:** 26/06/2015  
Z. Kisiel; E. Białkowska-Jaworska; L. Pszczółkowski; I. Uriarte; P. Écija; F. J. Basterretxea; E. J. Cocinero.
- 57** **Título del trabajo:** Unravelling the conformational landscape of nicotinoids: the structure of cotinine by broadband rotational spectroscopy (TD05)  
**Nombre del congreso:** 70th International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Champaign-Urbana, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 22/06/2015  
**Fecha de finalización:** 26/06/2015  
I. Uriarte; P. Écija; E. J. Cocinero; C. Pérez; E. Caballero-Mancebo; A. Lesarri.
- 58** **Título del trabajo:** What can we expect of high-resolution spectroscopies on carbohydrates? Flygare Award Lecture (WA02)  
**Nombre del congreso:** 70th International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Plenaria  
**Ciudad de celebración:** Champaign-Urbana, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 22/06/2015  
**Fecha de finalización:** 26/06/2015  
E. J. Cocinero; P. Écija; I. Uriarte; I. Usabiaga; J. A. Fernández; F. J. Basterretxea; A. Lesarri; B. G. Davis.



C

V

n

CURRÍCULUM VITAE NORMALIZADO

00c888ce9b068d4e5241150ac2216458

- 59 Título del trabajo:** Unravelling the conformational landscape of nicotinoids: the structure of cotinine by broadband rotational spectroscopy (CO19)  
**Nombre del congreso:** VII Jornadas de jóvenes investigadores en física atómica y molecular (J2IFAM2015)  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Jaén, España  
**Fecha de celebración:** 18/03/2015  
**Fecha de finalización:** 20/03/2015  
I. Uriarte; P. Écija; E. Caballero; C. Pérez; A. Lesarri; E. J. Cocinero.
- 60 Título del trabajo:** Conformational landscape of aromatic molecules: a rotational study of mephenesin and isobutamben (WA11)  
**Nombre del congreso:** The 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Bolonia, Italia  
**Fecha de celebración:** 02/09/2014  
**Fecha de finalización:** 06/09/2014  
M. Vallejo-López; P. Écija; L. Evangelisti; F. J. Basterretxea; E. J. Cocinero; A. Lesarri; F. Castaño; W. Caminati.
- 61 Título del trabajo:** Rotational Spectra of sugars: Ring-puckering in ribofuranose (WA02)  
**Nombre del congreso:** The 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Bolonia, Italia  
**Fecha de celebración:** 02/09/2014  
**Fecha de finalización:** 06/09/2014  
P. Écija; I. Uriarte; L. Spada; E. J. Cocinero; A. Lesarri; J. A. Fernández; W. Caminati.
- 62 Título del trabajo:** Rotational spectrum of zingerone: Checking the ab initio and DFT calculation methods (WA07)  
**Nombre del congreso:** The 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Bolonia, Italia  
**Fecha de celebración:** 02/09/2014  
**Fecha de finalización:** 06/09/2014  
P. Écija; I. Uriarte; A. Lesarri; F. Basterretxea; E.J Cocinero.
- 63 Título del trabajo:** The structure of the anesthetic fluoroxene by broadband rotational spectroscopy (WA09)  
**Nombre del congreso:** The 23rd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Bolonia, Italia  
**Fecha de celebración:** 02/09/2014  
**Fecha de finalización:** 06/09/2014  
I. Uriarte; P. Écija; L. Spada; A. Lesarri; J. A. Fernández; F. Castaño; W. Caminati; E.J Cocinero.



- 64** **Título del trabajo:** Equilibrium structure of piperidine (P62, WJ12)  
**Nombre del congreso:** 69th International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Champaign-Urbana, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 16/06/2014  
**Fecha de finalización:** 20/06/2014  
J. Demaison; H. D. Rudolph; C. Craig; P. Écija; E. J. Cocinero; A. Lesarri.
- 65** **Título del trabajo:** Non covalent interactions and internal dynamics in adducts of freons (P514, RJ16)  
**Nombre del congreso:** 69th International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Champaign-Urbana, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 16/06/2014  
**Fecha de finalización:** 20/06/2014  
W. Caminati; Q. Gou; L. Evangelisti; L. Spada; M. Vallejo; A. Lesarri; E. J. Cocinero.
- 66** **Título del trabajo:** Rotational spectra of adducts of pyridine with methane and its halides (P604, RB05)  
**Nombre del congreso:** 69th International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Champaign-Urbana, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 16/06/2014  
**Fecha de finalización:** 20/06/2014  
Q. Gou; M. Vallejo; A. Lesarri; E. J. Cocinero; W. Caminati.
- 67** **Título del trabajo:** Elucidating the structure of sugars in the gas phase  
**Nombre del congreso:** XI Carbohydrate Symposium  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Logro, La Rioja, España  
**Fecha de celebración:** 28/05/2014  
**Fecha de finalización:** 30/05/2014  
Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Patricia Écija; Francisco J. Basterretxea; José A. Fernández; Fernando Castaño.
- 68** **Título del trabajo:** Unraveling the Interactions Between Sugar Units in Jets Using Mass-Resolved Laser Spectroscopy  
**Nombre del congreso:** Spectroscopy and Dynamics of Molecules and Clusters  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Bhubaneshwar, India  
**Fecha de celebración:** 20/02/2014  
**Fecha de finalización:** 23/02/2014  
Imanol Usabiaga; Jorge González; Pedro F. Arnáiz; Alberto Lesarri; Emilio J. Cocinero; José A. Fernández.
- 69** **Título del trabajo:** Elucidating Structures of Carbohydrates by high resolution spectroscopies  
**Nombre del congreso:** 2nd Meeting of the RSEQ Chemical Biology Group  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)



**Ciudad de celebración:** Bilbao, País Vasco, España

**Fecha de celebración:** 04/02/2014

**Fecha de finalización:** 06/02/2014

Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Patricia Écija; Francisco J. Basterretxea; José A. Fernández; Fernando Castaño.

- 70** **Título del trabajo:** Synthesis of a novel Tn Antigen to experimentally determine its first hydration shell  
**Nombre del congreso:** 2nd Meeting of the RSEQ Chemical Biology Group  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Bilbao, País Vasco, España  
**Fecha de celebración:** 04/02/2014  
**Fecha de finalización:** 06/02/2014  
I. Bermejo; A. Avenozza; J. H. Busto; E. J. Cocinero; F. Corzana; J. Peregrina.
- 71** **Título del trabajo:** Determination of the structure of BINOL in the gas phase  
**Nombre del congreso:** VI Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular J2IFAM2014  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Bilbao, País Vasco, España  
**Fecha de celebración:** 22/01/2014  
**Fecha de finalización:** 24/01/2014  
Iciar Uriarte; Patricia Écija; Alberto Lesarri; Ibón Alkorta; José Elguero; Emilio J. Cocinero.
- 72** **Título del trabajo:** Hydrogen bonding in pyridine•••freon complexes: sigma or pi interactions?  
**Nombre del congreso:** VI Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular J2IFAM2014  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Bilbao, País Vasco, España  
**Fecha de celebración:** 22/01/2014  
**Fecha de finalización:** 24/01/2014  
Montserrat Vallejo; Q. Gou; Lorenzo Spada; Emilio J. Cocinero; Walther Caminati; Alberto Lesarri.
- 73** **Título del trabajo:** Probing Carbohydrate•••Peptide interaction: Glucose and Phenol clusters via laser spectroscopy  
**Nombre del congreso:** VI Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular J2IFAM2014  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Bilbao, País Vasco, España  
**Fecha de celebración:** 22/01/2014  
**Fecha de finalización:** 24/01/2014  
Imanol Usabiaga; Pedro F. Arnaiz; Jorge González; Judith Millán; Iker León; Emilio J. Cocinero; José A. Fernández.
- 74** **Título del trabajo:** The uncommon three-ring structure of Scopoline revealed from gas-phase isomerization of Scopoline  
**Nombre del congreso:** VI Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular J2IFAM2014  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Bilbao, País Vasco, España  
**Fecha de celebración:** 22/01/2014



**Fecha de finalización:** 24/01/2014

Patricia Écija; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Francisco J. Batteredxea; José A. Fernández; Fernando Castaño.

- 75 Título del trabajo:** Determinando estructuras de azúcares por espectroscopías de alta resolución (O-11)  
**Nombre del congreso:** X Simposio de Investigadores Jóvenes-Sigma Aldrich  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Madrid, España  
**Fecha de celebración:** 06/11/2013  
**Fecha de finalización:** 09/11/2013  
Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Patricia Écija; Francisco Batteredxea; José A. Fernández; Fernando Castaño.
- 76 Título del trabajo:** Mass-Resolved IR Spectroscopy of Reverse Nanomicelles in Supersonic Expansions (OC1)  
**Nombre del congreso:** 20th International Conference on "Horizons in Hydrogen Bond Research", Antwerp2013  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Amberes, Bélgica  
**Fecha de celebración:** 15/09/2013  
**Fecha de finalización:** 20/09/2013  
Iker León; Judith Millán; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; José A. Fernández.
- 77 Título del trabajo:** New Developments in Microwave Spectroscopy: Rotational Analysis of Phenol and Sevoflurane Clusters (IL-4)  
**Nombre del congreso:** XII Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics, IBBER2013  
**Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Sevilla, Andalucía, España  
**Fecha de celebración:** 09/09/2013  
**Fecha de finalización:** 09/09/2013  
Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Patricia Écija; Francisco Batteredxea; José A. Fernández; Fernando Castaño.
- 78 Título del trabajo:** Concerted proton transfer and conformational equilibria in bi-molecules of carboxylic acids  
**Nombre del congreso:** The 23rd Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, HRMS 2013  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Budapest, Hungría  
**Fecha de celebración:** 25/08/2013  
**Fecha de finalización:** 30/08/2013  
Walther Caminati; Luca Evangelisti; Gang Feng; Q. Gou; A. Maris; Laura. B. Favero; Emilio J. Cocinero; Patricia Écija; Fernando Castaño; Alberto Lesarri; R. Meyer.
- 79 Título del trabajo:** Rotational Spectrum and Conformational Preferences of the 6-Carbon Cetose sugar of Fructose (B-11)  
**Nombre del congreso:** The 23rd Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, HRMS 2013  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)



**Ciudad de celebración:** Budapest, Hungría

**Fecha de celebración:** 25/08/2013

**Fecha de finalización:** 30/08/2013

Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Patricia Écija; Álvaro Cimas; Benjamin G. Davis; Francisco Baterretxea; José A. Fernández; Fernando Castaño.

- 80** **Título del trabajo:** Structure of Tropane Alkaloids from Rotational Spectra: Scopolin vs. Scopolin (D-1)  
**Nombre del congreso:** The 23rd Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, HRMS 2013  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Budapest, Hungría  
**Fecha de celebración:** 25/08/2013  
**Fecha de finalización:** 30/08/2013  
Montserrat Vallejo López; Patricia Écija; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Francisco Baterretxea; José A. Fernández; Fernando Castaño.
- 81** **Título del trabajo:** The cm-, mm and submm-wave spectrum of allyl isocyanide and radioastronomical observations in Orion KL and the Primos line survey D-34)  
**Nombre del congreso:** The 23rd Colloquium on High Resolution Molecular Spectroscopy, HRMS 2013  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Budapest, Hungría  
**Fecha de celebración:** 25/08/2013  
**Fecha de finalización:** 30/08/2013  
I. Kaykal; L. Marulès; T. R. Huet; R. A. Motiyenko; Patricia Écija; Emilio J. Cocinero; F. J. Basterretxea; J. A. Fernández; F. Castaño; Alberto Lesarri; J. C. Guillemin; B. Tercero; J. Cernicharo.
- 82** **Título del trabajo:** An improved analysis of the sevoflurane•benzene structure by chirped pulse FTMW Spectroscopy (MH07)  
**Nombre del congreso:** 68h International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 17/06/2013  
**Fecha de finalización:** 21/07/2013  
**Entidad organizadora:** The Ohio State University **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América  
N. A. Seifert; C. Pérez; D. P. Zaleski; J. L. Neil; B. H. Pate; Alberto Lesarri; M. Vallejo; Emilio J. Cocinero; Fernando Castaño.
- 83** **Título del trabajo:** Elucidating the structure of sugars: MW spectroscopy combined with ultrafast UV laser vaporization (MH14)  
**Nombre del congreso:** 68h International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 17/06/2013  
**Fecha de finalización:** 21/07/2013  
**Entidad organizadora:** The Ohio State University **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América  
Emilio J. Cocinero; Patricia Écija; Francisco Baterretxea; José A. Fernández; Fernando Castaño; Alberto Lesarri; Álvaro Cimas; Jens-Uwe Grabow.



- 84 Título del trabajo:** MW Spectroscopy coupled with ultrafast UV laser vaporization: Succinic acid in the gas phase (RK13)  
**Nombre del congreso:** 68h International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 17/06/2013  
**Fecha de finalización:** 21/07/2013  
**Entidad organizadora:** The Ohio State University   **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América  
Estíbaliz Méndez; Patricia Écija; Emilio J. Cocinero; Fernando Castaño; Francisco Basterretxea; Peter D. Godfrey; Donald McNaughton; Michaela K. Jahn; Rajappan Nair; Jens-Uwe Grabow; I. Kleiner.
- 85 Título del trabajo:** MW systematic study of Alkaloids: The distorted tropane of Scopoline (MH03)  
**Nombre del congreso:** 68h International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 17/06/2013  
**Fecha de finalización:** 21/07/2013  
**Entidad organizadora:** The Ohio State University   **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América  
Patricia Écija; Emilio J. Cocinero; Francisco Basterretxea; José A. Fernández; Fernando Castaño; Alberto Lesarri.
- 86 Título del trabajo:** Structure determination of two stereoisomers of sevoflurane dimer by chirped pulse FTMW Spectroscopy (MH08)  
**Nombre del congreso:** 68h International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 17/06/2013  
**Fecha de finalización:** 21/07/2013  
**Entidad organizadora:** The Ohio State University   **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América  
N. A. Seifert; C. Pérez; D. P. Zaleski; J. L. Neil; B. H. Pate; Alberto Lesarri; M. Vallejo; Emilio J. Cocinero; Fernando Castaño.
- 87 Título del trabajo:** The cm-, mm- and submm-wave spectrum of allyl isocyanide and radioastronomical observations in Orion KL and PRIMOS line survey (FA07)  
**Nombre del congreso:** 68h International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 17/06/2013  
**Fecha de finalización:** 21/07/2013  
**Entidad organizadora:** The Ohio State University   **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América  
I. Kaykal; R. A. Motiyenko; L. Marulès; T Huet; Patricia Écija; Emilio J. Cocinero; F. J. Basterretxea; J. A. Fernández; F. Castaño; B. Tercero; J. Cernicharo; Alberto Lesarri.



- 88 Título del trabajo:** Rotational Spectra and ab initio modeling of dicarboxylic acids: Succinic Acid  
**Nombre del congreso:** European Aerosol Conference, EAC 2013  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Praga, República Checa  
**Fecha de celebración:** 01/06/2013  
**Fecha de finalización:** 06/06/2013  
**Ciudad entidad organizadora:** Praga, República Checa  
Estibaliz Méndez; Patricia Écija; Emilio J. Cocinero; Fernando Castaño; Francisco J. Basterretxea; Peter D. Godfrey; Michaela K. Jahn; Rajappan Nair; Jens-Uwe Grabow.
- 89 Título del trabajo:** DNA base – Amino acid interactions: a theoretical study  
**Nombre del congreso:** V Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Madrid, España  
**Fecha de celebración:** 13/02/2013  
**Fecha de finalización:** 15/02/2013  
Jorge González; Irene Baños; Emilio J. Cocinero; José A. Fernández; Judith Millán.
- 90 Título del trabajo:** Espectroscopía electrónica con resolución de masas de beta-Fenil-D-Glucopiranosas-D-Glucosa en expansiones supersónicas  
**Nombre del congreso:** V Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Madrid, España  
**Fecha de celebración:** 13/02/2013  
**Fecha de finalización:** 15/02/2013  
Imanol Usabiaga; Pedro F. Arnaiz; Jorge González; Judith Millán; Iker León; Emilio J. Cocinero; José A. Fernández.
- 91 Título del trabajo:** Rotational Spectra of Sugars: Ribose and Fructose  
**Nombre del congreso:** V Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Madrid, España  
**Fecha de celebración:** 13/02/2013  
**Fecha de finalización:** 15/02/2013  
Patricia Écija; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Álvaro Cimas; Benjamin G. Davis; Francisco Basterretxea; Jens-Uwe Grabow; José A. Fernández; Fernando Castaño.
- 92 Título del trabajo:** Rotational spectra and ab initio modeling of monolignols  
**Nombre del congreso:** V Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Madrid, España  
**Fecha de celebración:** 13/02/2013  
**Fecha de finalización:** 15/02/2013  
Montserrat Vallejo; Patricia Écija; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; José A. Fernández; Francisco J. Basterretxea; Fernando Castaño.



- 93** **Título del trabajo:** Structure of Succinic Acid in the gas phase  
**Nombre del congreso:** V Jornadas de Jóvenes Investigadores en Física Atómica y Molecular  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Madrid, España  
**Fecha de celebración:** 13/02/2013  
**Fecha de finalización:** 15/02/2013  
Estíbaliz Méndez; Lorena Miñambres; Patricia Écija; Emilio J. Cocinero; Fernando Castaño; Francisco Basterretxea.
- 94** **Título del trabajo:** Elucidating the Structure of Sugars  
**Nombre del congreso:** 2nd National conference on laboratory and molecular astrophysics  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Sevilla, Andalucía, España  
**Fecha de celebración:** 14/11/2012  
**Fecha de finalización:** 16/11/2012  
Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Patricia Écija; Francisco J. Basterretxea; José A. Fernández; Fernando Castaño.
- 95** **Título del trabajo:** Esclareciendo las estructuras de los azúcares (PR-3)  
**Nombre del congreso:** IX Simposio de Investigadores Jóvenes  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Zaragoza, España  
**Fecha de celebración:** 07/11/2012  
**Fecha de finalización:** 10/11/2012  
Emilio J. Cocinero.
- 96** **Título del trabajo:** Elucidating bio-structures: MW spectroscopy and UV ultrafast laser vaporization  
**Nombre del congreso:** Seminario en el Institut des Sciences Moléculaires d'Orsay  
**Tipo evento:** Seminario **Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Paris, Francia  
**Fecha de celebración:** 16/10/2012  
**Fecha de finalización:** 16/10/2012  
E. J. Cocinero.
- 97** **Título del trabajo:** Conformational Flexibility of Tropanes: The Rotational Spectrum of Pseudo-Pelletierine (J10)  
**Nombre del congreso:** The 22nd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Prague, República Checa  
**Fecha de celebración:** 04/09/2012  
**Fecha de finalización:** 08/09/2012  
Montserrat Vallejo; Patricia Écija; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Francisco J. Basterretxea; José A. Fernández; Fernando Castaño.



- 98 Título del trabajo:** From succinic acid to succinic anhydride: Analysis of the rotational spectra (H13)  
**Nombre del congreso:** The 22nd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Praga, República Checa  
**Fecha de celebración:** 04/09/2012  
**Fecha de finalización:** 08/09/2012  
Michaela K. Jahn; Pradeep R. Nair; Jens-Uwe Grabow; Peter D. Godfrey; Donald McNaughton; Alberto Lesarri; Patricia Écija; Estíbaliz Méndez; Francisco J. Basterretxea; Fernando Castaño; Emilio J. Cocinero; N. Vogt; J. Vogt.
- 99 Título del trabajo:** Rotational Spectra of Sugars: The Six Most-Stable Conformations of Ribose (M2)  
**Nombre del congreso:** The 22nd International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Prague, República Checa  
**Fecha de celebración:** 04/09/2012  
**Fecha de finalización:** 08/09/2012  
Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Patricia Écija; Francisco J. Basterretxea; Jens-Uwe Grabow; José A. Fernández; Fernando Castaño.
- 100 Título del trabajo:** 3D-Structures of Carbohydrates in the Gas Phase (0115)  
**Nombre del congreso:** 26th International Carbohydrate Symposium (ICS 2012)  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote  
**Ciudad de celebración:** Madrid, España  
**Fecha de celebración:** 22/07/2012  
**Fecha de finalización:** 27/07/2012  
Emilio J. Cocinero.
- 101 Título del trabajo:** Fourier Transform microwave studies of Bi-molecules of carboxylic acids  
**Nombre del congreso:** 67th International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 18/06/2012  
**Fecha de finalización:** 22/06/2012  
**Entidad organizadora:** The Ohio State University    **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América  
Luca Evangelisti; Gang Feng; Gou Qian; Assimo Maris; Walther Caminati; Laura B. Favero; Emilio J. Cocinero; Patricia Écija; José A. Fernández; Fernando Castaño; Alberto Lesarri; Rolf Meyer.
- 102 Título del trabajo:** MW Spectroscopy coupled with ultrafast UV laser Vaporization: Ribose found in the Gas Phase  
**Nombre del congreso:** 67th International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 18/06/2012  
**Fecha de finalización:** 22/06/2012  
**Entidad organizadora:** The Ohio State University    **Tipo de entidad:** Universidad



**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América

Emilio J. Cocinero; Patricia Écija; Francisco Basterretxea; José A. Fernández; Fernando Castaño; Alberto Lesarri; Jens-Uwe Grabow.

**103 Título del trabajo:** Rotational spectroscopy of isocyanic molecules: Allyl isocyanide and diisocyanomethane

**Nombre del congreso:** 67th International Symposium on Molecular Spectroscopy

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América

**Fecha de celebración:** 18/06/2012

**Fecha de finalización:** 22/06/2012

**Entidad organizadora:** The Ohio State University      **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América

Roman A. Motiyenko; Laurent Margulès; Imane Haykal; Therese R. Huet; Emilio J. Cocinero; Patricia Écija; José A. Fernández; Fernando Castaño; Alberto Lesarri; Jean-Claude Guillemin.

**104 Título del trabajo:** Semiexperimental equilibrium structures for the equatorial conformers of N-methylpiperidone and tropinone by the mixed estimation method (TC-13)

**Nombre del congreso:** 67th International Symposium on Molecular Spectroscopy

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América

**Fecha de celebración:** 18/06/2012

**Fecha de finalización:** 22/06/2012

**Entidad organizadora:** The Ohio State University      **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América

Roman A. Motiyenko; Laurent Margulès; Imane Haykal; Therese R. Huet; Emilio J. Cocinero; Patricia Écija; José A. Fernández; Fernando Castaño; Alberto Lesarri; Jean-Claude Guillemin.

**105 Título del trabajo:** Structure of the Sevoflurane-Benzene complex by chirped-pulse FTMW Spectroscopy

**Nombre del congreso:** 67th International Symposium on Molecular Spectroscopy

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América

**Fecha de celebración:** 18/06/2012

**Fecha de finalización:** 22/06/2012

**Entidad organizadora:** The Ohio State University      **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América

Nathan A. Seifert; Daniel P. Zaleski; Brooks Pate; Justin L. Neill; Alberto Lesarri; Montserrat Vallejo; Emilio J. Cocinero; Fernando Castaño.

**106 Título del trabajo:** The sugar ribose – structural complexity in the gas phase

**Nombre del congreso:** Ionic Liquids. 111. Hauptversammlung der Deutschen Bunsen-Gesellschaft für Physikalische Chemie e.V.

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Ciudad de celebración:** Leipzig, Alemania

**Fecha de celebración:** 17/05/2012

**Fecha de finalización:** 19/05/2012

Emilio J. Cocinero; Patricia Écija; Francisco J. Basterretxea; José A. Fernández; Fernando Castaño; Alberto Lesarri; Jens-Uwe Grabow.



- 107** **Título del trabajo:** Binding energy of micro-hydrated carbohydrates: Measurements and interpretation (HT-2)  
**Nombre del congreso:** Isolated Biomolecules and Biomolecular Interactions (IBBI 2012)  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Les Diablerets, Suiza  
**Fecha de celebración:** 22/01/2012  
**Fecha de finalización:** 27/01/2012  
Pierre Çarcabal; Emilio J. Cocinero; John P. Simons.
- 108** **Título del trabajo:** MW spectroscopy and UV ultrafast laser vaporization: Elucidating 3D-biostructures - Ribose found in the Gas Phase (HT-6)  
**Nombre del congreso:** Isolated Biomolecules and Biomolecular Interactions (IBBI 2012)  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Les Diablerets, Suiza  
**Fecha de celebración:** 22/01/2012  
**Fecha de finalización:** 27/01/2012  
Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Patricia Écija; Íker León; José A. Fernández; Jens-Uwe Grabow; Walther Caminati; Fernando Castaño.
- 109** **Título del trabajo:** Mimicking Anaesthetic-Receptor Interaction in Jets: a Combined Spectroscopic and Computational Study of Propofol•••Phenol  
**Nombre del congreso:** Isolated Biomolecules and Biomolecular Interactions (IBBI 2012)  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Les Diablerets, Suiza  
**Fecha de celebración:** 22/01/2012  
**Fecha de finalización:** 27/01/2012  
Íker León; Emilio J. Cocinero; Fernando Castaño; José A. Fernández; Judith Millán; Alberto Lesarri.
- 110** **Título del trabajo:** Formation of water polyhedrons in the solvation of propofol  
**Nombre del congreso:** XIX International Conference on "Horizons in Hydrogen Bond Research"  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Göttingen, Alemania  
**Fecha de celebración:** 11/09/2011  
**Fecha de finalización:** 17/09/2011  
Íker León; Emilio J. Cocinero; Anouk M. Rijs; Judith Millán; Alberto Lesarri; Fernando Castaño; José A. Fernández.
- 111** **Título del trabajo:** Halogen bond and internal dynamics in CCIF3-H2O (WH08)  
**Nombre del congreso:** 66th International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 20/06/2011  
**Fecha de finalización:** 24/06/2011  
**Entidad organizadora:** The Ohio State University      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América  
Luca Evangelisti; Gang Feng; Walther Caminati; Patricia Écija; Emilio J. Cocinero; Fernando Castaño.



- 112 Título del trabajo:** Semi-experimental (rs/re) structures for the heavy atom backbones of two moderately large molecules obtained from microwave spectroscopy and quantum chemical calculations (MH08)  
**Nombre del congreso:** 66th International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 20/06/2011  
**Fecha de finalización:** 24/06/2011  
**Entidad organizadora:** The Ohio State University   **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América  
Norman C. Craig; Alberto Lesarri; Emilio J. Cocinero; Jens-Uwe Grabow.
- 113 Título del trabajo:** Computaional studies of saccharide hydration: Spectroscopy, structure and dynamics (P-248)  
**Nombre del congreso:** 241st ACS National Meeting & Exposition  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Anaheim, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 27/03/2011  
**Fecha de finalización:** 31/03/2011  
Madeleine Pincu; Hong-Bin Xie; Jin Lin; Brina Brauer; John P. Simons; Ilana Bar; Emilio J. Cocinero; Nitzan Mayorkas; Victoria Buch; R. Benny Gerber.
- 114 Título del trabajo:** Gas phase spectroscopy of hydrated carbohydrates: The anomeric effect laid bare (P-28)  
**Nombre del congreso:** 241st ACS National Meeting & Exposition  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Anaheim, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 27/03/2011  
**Fecha de finalización:** 31/03/2011  
John P. Simons; Nitzan Mayorkas; Emilio J. Cocinero; Svemir Rudic; R. Benny Gerber; Benjamin G. Davis.
- 115 Título del trabajo:** Anaesthetic-Amino Acid Interactions in Gas-Phase: The Benzocaine-Toluene Complex (2-5)  
**Nombre del congreso:** Molecular & Ionic Cluster Conference (MIC2010)  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Niigata, Japón  
**Fecha de celebración:** 05/09/2010  
**Fecha de finalización:** 10/09/2010  
Edurne Aguado; Íker León; Emilio J. Cocinero; Anouk M. Rijs; Sander Jaelqx; Alberto Lesarri; Fernando Castaño; José A. Fernández.
- 116 Título del trabajo:** Conformational Landscape of Anticholinergic and Antipyretic drugs in the Gas Phase (2-3)  
**Nombre del congreso:** Molecular & Ionic Cluster Conference (MIC2010)  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Niigata, Japón  
**Fecha de celebración:** 05/09/2010



**Fecha de finalización:** 10/09/2010

Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Patricia Écija; José A. Fernández; Jens-Uwe Grabow; Walther Caminati; Fernando Castaño.

**117 Título del trabajo:** Non-covalent interactions in supersonic expansions: Propofol•and its hydrated clusters (3-18)

**Nombre del congreso:** Molecular & Ionic Cluster Conference (MIC2010)

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Niigata, Japón

**Fecha de celebración:** 05/09/2010

**Fecha de finalización:** 10/09/2010

Íker León; Emilio J. Cocinero; Judith Millán; Anouk M. Rijs; Sander Jaelqx; Alberto Lesarri; Fernando Castaño; José A. Fernández.

**118 Título del trabajo:** Non-covalent interactions in supersonic expansions: Propofol•H<sub>2</sub>O cluster (P-489)

**Nombre del congreso:** 10th European Conference on Atoms, Molecules and Photons (ecamp10)

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Salamanca, Castilla y León, España

**Fecha de celebración:** 04/07/2010

**Fecha de finalización:** 09/07/2010

Íker León; Emilio J. Cocinero; Fernando Castaño; José A. Fernández; Judith Millán; Alberto Lesarri.

**119 Título del trabajo:** Non-covalent interactions in supersonic expansions: The Propofol dimer (P-214)

**Nombre del congreso:** 10th European Conference on Atoms, Molecules and Photons (ecamp10)

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Salamanca, Castilla y León, España

**Fecha de celebración:** 04/07/2010

**Fecha de finalización:** 09/07/2010

Íker León; Judith Millán; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Fernando Castaño; José A. Fernández.

**120 Título del trabajo:** Conformational landscape of nicotinoids: Solving the conformational disparity” of anabasine (WH05)

**Nombre del congreso:** 65th International Symposium on Molecular Spectroscopy

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América

**Fecha de celebración:** 21/06/2010

**Fecha de finalización:** 25/06/2010

**Entidad organizadora:** The Ohio State University      **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América

Alberto Lesarri; Emilio J. Cocinero; Luca Evangelisti; Richard D. Suenram; Walther Caminati; Jens-Uwe Grabow.

**121 Título del trabajo:** Rotational investigation of tropane alkaloids (WH04)

**Nombre del congreso:** 65th International Symposium on Molecular Spectroscopy

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América



**Fecha de celebración:** 21/06/2010

**Fecha de finalización:** 25/06/2010

**Entidad organizadora:** The Ohio State University    **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América

Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Patricia Écija; Jens-Uwe Grabow; José A. Fernández; Fernando Castaño.

**122 Título del trabajo:** Conformational Flexibility of Tropane alkaloids: Tropinone, Scopolin and Scopolin (P-14)

**Nombre del congreso:** Isolated Biomolecules and Biomolecular Interactions (IBBI 2010)

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Berlín, Alemania

**Fecha de celebración:** 12/06/2010

**Fecha de finalización:** 17/06/2010

Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Patricia Écija; José A. Fernández; Jens-Uwe Grabow; Fernando Castaño.

**123 Título del trabajo:** Microsolvation of Anesthetics in Supersonic Expansions: The Propofol Water System (P-18)

**Nombre del congreso:** Isolated Biomolecules and Biomolecular Interactions (IBBI 2010)

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Berlín, Alemania

**Fecha de celebración:** 12/06/2010

**Fecha de finalización:** 17/06/2010

Íker León; Emilio J. Cocinero; Fernando Castaño; José A. Fernández; Judith Millán; Alberto Lesarri.

**124 Título del trabajo:** A Combined Spectroscopic and Theoretical Study of Propofol and its Hydrated Clusters (P34)

**Nombre del congreso:** IX Congreso de Fotoquímica

**Ámbito geográfico:** Nacional

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Leioa, País Vasco, España

**Fecha de celebración:** 21/09/2009

**Fecha de finalización:** 23/09/2009

Íker León; Emilio J. Cocinero; Judith Millán; Alberto Lesarri; Fernando Castaño; José A. Fernández.

**125 Título del trabajo:** Structures of Tropinone in Gas Phase (P39)

**Nombre del congreso:** IX Congreso de Fotoquímica

**Ámbito geográfico:** Nacional

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Leioa, País Vasco, España

**Fecha de celebración:** 21/09/2009

**Fecha de finalización:** 23/09/2009

Emilio J. Cocinero; Patricia Écija; José A. Fernández; Jens-Uwe Grabow; Fernando Castaño; Alberto Lesarri.

**126 Título del trabajo:** Carbohydrates in the Gas Phase

**Nombre del congreso:** Biological Molecules in the Gas Phase (Gordon Research Conference)

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)



C

V

n

CURRÍCULUM VÍTAE NORMALIZADO

00c888ce9b068d4e5241150ac2216458

**Ciudad de celebración:** Tilton, Estados Unidos de América

**Fecha de celebración:** 05/07/2009

**Fecha de finalización:** 10/07/2009

Emilio J. Cocinero; Eva-Cristina Stanca-Kaposta; Zheng Su; David P. Gamblin; Eoin M. Scanlan; Benjamin G. Davis; John P. Simons.

**127 Título del trabajo:** Conformational Change and Selectivity in Solvated Carbohydrates (MON-12)

**Nombre del congreso:** Biological Molecules in the Gas Phase (Gordon Research Conference)

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Tilton, Estados Unidos de América

**Fecha de celebración:** 05/07/2009

**Fecha de finalización:** 10/07/2009

John P. Simons; Emilio J. Cocinero; Eva-Cristina Stanca-Kaposta; David P. Gamblin; Benjamin G. Davis.

**128 Título del trabajo:** Structure and Conformation of tropinone and propofol and theirs hydrated clusters in the Gas Phase (MON-02)

**Nombre del congreso:** Biological Molecules in the Gas Phase (Gordon Research Conference)

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Tilton, Estados Unidos de América

**Fecha de celebración:** 05/07/2009

**Fecha de finalización:** 10/07/2009

Emilio J. Cocinero; Íker León; Patricia Écija; Alberto Lesarri; José A. Fernández; Fernando Castaño.

**129 Título del trabajo:** The Benzocaine-Phenol Complex (MON-05)

**Nombre del congreso:** Biological Molecules in the Gas Phase (Gordon Research Conference)

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Tilton, Estados Unidos de América

**Fecha de celebración:** 05/07/2009

**Fecha de finalización:** 10/07/2009

Íker León; Emilio J. Cocinero; Judith Millán; Alberto Lesarri; Fernando Castaño; José A. Fernández.

**130 Título del trabajo:** Microsolvation of Carbohydrates in Gas Phase

**Nombre del congreso:** Gordon Research Conference. Molecular and Ionic Clusters

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Aussois, Francia

**Fecha de celebración:** 07/09/2008

**Fecha de finalización:** 12/09/2008

Emilio J. Cocinero; Eva-Cristina Stanca-Kaposta; David P. Gamblin; Eoin M. Scanlan; Romano T. Kroemer; Benjamin G. Davis; John P. Simons.

**131 Título del trabajo:** 3D Carbohydrate Structures: from Glucose to Glycobiology

**Nombre del congreso:** The 4th Glycan Forum in Berlin

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

**Ciudad de celebración:** Berlin, Alemania

**Fecha de celebración:** 23/05/2008

**Fecha de finalización:** 24/05/2008



John P. Simons; Eva-Cristina Kaposta; Emilio J. Cocinero; Bo Liu; David P. Gamblin; Benjamin G. Davis; Romano T. Kroemer.

**132 Título del trabajo:** Structure and Conformation of Carbohydrates and Peptides in gas phase (P33)

**Nombre del congreso:** The 4th Glycan Forum in Berlin

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Berlin, Alemania

**Fecha de celebración:** 23/05/2008

**Fecha de finalización:** 24/05/2008

Eva-Cristina Stanca-Kaposta; Emilio J. Cocinero; David P. Gamblin; Timothy D. Vaden; Anouk M. Rijs; Lavina C. Snoek; Benjamin G. Davis; John P. Simons.

**133 Título del trabajo:** Probing the 3D Structure of Carbohydrates and Peptides in the Gas Phase (TH10)

**Nombre del congreso:** Isolated biomolecules and biomelecular interactions (IBBBI 08)

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Ciudad de celebración:** Valladolid, España

**Fecha de celebración:** 13/04/2008

**Fecha de finalización:** 18/04/2008

Eva-Cristina Kaposta; Emilio J. Cocinero; Bo Liu; David P. Gamblin; Lavina C. Snoek; Benjamin G. Davis; John P. Simons.

**134 Título del trabajo:** Structure and Conformation of Carbohydrates and Peptides in the Gas Phase (PI-10)

**Nombre del congreso:** Isolated biomolecules and biomelecular interactions (IBBBI 08)

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Valladolid, España

**Fecha de celebración:** 13/04/2008

**Fecha de finalización:** 18/04/2008

Emilio J. Cocinero; Eva-Cristina Kaposta; Bo Liu; David P. Gamblin; Eoin M. Scanlan; Romano T. Kroemer; Lavina C. Snoek; Benjamin G. Davis; John P. Simons.

**135 Título del trabajo:** Conformational Landscapes of Polysaccharides and Glycopeptides: Spectroscopy and Modelling of the Building Blocks (CARB24)

**Nombre del congreso:** The 235th ACS National Meeting

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Ciudad de celebración:** New Orleans, Estados Unidos de América

**Fecha de celebración:** 06/04/2008

**Fecha de finalización:** 10/04/2008

Timothy D. Vaden; Emilio J. Cocinero; Eva-Cristina Kaposta; David P. Gamblin; Eoin M. Scanlan; Lavina C. Snoek; Benjamin G. Davis; John P. Simons.

**136 Título del trabajo:** Sweetness and light: from Glucose to Glycobiology

**Nombre del congreso:** Molecular and nanodynamics: from atoms to biomolecules

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Ciudad de celebración:** Roma, Italia

**Fecha de celebración:** 12/10/2007

**Fecha de finalización:** 13/10/2007



John P. Simons; Eva-Cristina Kaposta; Emilio J. Cocinero; Bo Liu; Benjamin G. Davis; David P. Gamblin; Romano T. Kroemer. En: *Physica Scripta*. 78 - 058124, pp. 1 - 7.

- 137 Título del trabajo:** Understanding the Conformational Landscape of Carbohydrates in the Gas Phase (6B)  
**Nombre del congreso:** Gordon Research Conference Biological Molecules In The Gas Phase  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Boston, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 22/07/2007  
**Fecha de finalización:** 27/07/2007  
Emilio J. Cocinero; Eva-Cristina Kaposta; Bo Liu; James Screen; Lavina C. Snoek; John P. Simons; David P. Gamblin; Benjamin G. Davis.
- 138 Título del trabajo:** Understanding the shapes of complex biomolecules: What can infrared spectroscopy tell us?  
**Nombre del congreso:** Gordon Research Conference Biological Molecules In The Gas Phase  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Boston, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 22/07/2007  
**Fecha de finalización:** 27/07/2007  
Timothy D. Vaden; Emilio J. Cocinero; Eva-Cristina Kaposta; Bo Liu; Neil A. Macleod; Tjalling de Boer; James Screen; Lavina C. Snoek; John P. Simons; David P. Gamblin; Benjamin G. Davis.
- 139 Título del trabajo:** Probing the Glycosidic Linkage: Competition between Intra- and Intermolecular Hydrogen Bonding in the Stabilization of Carbohydrate Conformations (P18)  
**Nombre del congreso:** Laser for Science Facility User Meeting  
**Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Abingdon, Reino Unido  
**Fecha de celebración:** 20/11/2006  
**Fecha de finalización:** 22/11/2006  
Cristina Kaposta; Bo Liu; Emilio J. Cocinero; Neil A. Macleod; John P. Simons; David P. Gamblin; Benjamin G. Davis.
- 140 Título del trabajo:** Gas-Phase Structures of Sarcosine and beta-Aminobutyric Acid by their Jet Cooled Rotational Spectra (GV-FAM-CP47)  
**Nombre del congreso:** XXX Reunión Bienal de RESQ  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Lugo, Galicia, España  
**Fecha de celebración:** 19/09/2005  
**Fecha de finalización:** 23/09/2005  
Pablo Villanueva; Emilio J. Cocinero; María E. Sanz; Alberto Lesarri; Juan C. López; José L. Alonso.
- 141 Título del trabajo:** Alpha-amino Acids in Gas-phase: Jet-cooled Rotational Spectra of Leucine, Isoleucine and alpha-Aminobutyric acid (RI02)  
**Nombre del congreso:** 60th International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 20/06/2005



**Fecha de finalización:** 24/06/2005

**Entidad organizadora:** The Ohio State University      **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América

Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Juan C. López; José L. Alonso.

**142 Título del trabajo:** Rotational spectra of Glycine N-methyl derivatives: N,N-dimethylglycine and Sarcosine (RC11)

**Nombre del congreso:** 60th International Symposium on Molecular Spectroscopy

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América

**Fecha de celebración:** 20/06/2005

**Fecha de finalización:** 24/06/2005

**Entidad organizadora:** The Ohio State University      **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América

Emilio J. Cocinero; Pablo Villanueva; María E. Sanz; Alberto Lesarri; Juan C. López; José L. Alonso.

**143 Título del trabajo:** The Glycine-Water Dimer (TF08)

**Nombre del congreso:** 60th International Symposium on Molecular Spectroscopy

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América

**Fecha de celebración:** 20/06/2005

**Fecha de finalización:** 24/06/2005

**Entidad organizadora:** The Ohio State University      **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América

José L. Alonso; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Juan C. López.

**144 Título del trabajo:** Gas Phase Structure of Natural Amino Acids: Theory and Experiment in concert (A22)

**Nombre del congreso:** Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA2004)

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Valladolid, España

**Fecha de celebración:** 15/09/2004

Emilio J. Cocinero; Raquel Sánchez; Santiago Mata; Susana Blanco; María E. Sanz; Alberto Lesarri; Juan C. López; José L. Alonso.

**145 Título del trabajo:** The Structure of Isolated TeSe from Rotational Investigations: Bond length, Rotational Parameters and Hyperfine Constant (RH13)

**Nombre del congreso:** 59th International Symposium on Molecular Spectroscopy

**Ámbito geográfico:** Internacional no UE

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América

**Fecha de celebración:** 21/06/2004

**Fecha de finalización:** 25/06/2004

**Entidad organizadora:** The Ohio State University      **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América

Melanie Schnell; Deike Banser; Jens-Uwe Grabow; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; José L. Alonso.



- 146 Título del trabajo:** Gas Phase Structure of Natural Amino Acids (HT2)  
**Nombre del congreso:** Molecules of Biological Interest in Gas Phase  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Exeter, Reino Unido  
**Fecha de celebración:** 04/2004  
José L. Alonso; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Juan C. López.
- 147 Título del trabajo:** The Glycine-Water Dimer (P38)  
**Nombre del congreso:** Molecules of Biological Interest in Gas Phase  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Exeter, Reino Unido  
**Fecha de celebración:** 04/2004  
José L. Alonso; Emilio J. Cocinero; Alberto Lesarri; Juan C. López.
- 148 Título del trabajo:** The Shape of cis- and trans- 4-Hydroxyproline in Gas Phase  
**Nombre del congreso:** Molecules of Biological Interest in Gas Phase  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Exeter, Reino Unido  
**Fecha de celebración:** 04/2004  
Alberto Lesarri; Emilio J. Cocinero; Juan C. López; José L. Alonso.
- 149 Título del trabajo:** Espectroscopía de Microondas en jets supersónicos  
**Nombre del congreso:** 1er Congreso Nacional de Astrofísica Molecular: Una visión general del potencial de los grupos de química españoles antes los nuevos desafíos de la Astrofísica  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Ciudad Real, Castilla-La Mancha, España  
**Fecha de celebración:** 01/12/2003  
**Fecha de finalización:** 04/12/2003  
Emilio J. Cocinero; José L. Alonso; Juan C. López; Alberto Lesarri; Susana Blanco; María E. Sanz; Santiago Mata; Raquel Sánchez.
- 150 Título del trabajo:** Amino Acid Hydrogen bonding in Gas-Phase: Jet-Cooled Laser-Ablation Rotational Studies (1P-18)  
**Nombre del congreso:** XVth International Conference on Horizons in Hydrogen Bond Research  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Berlin, Alemania  
**Fecha de celebración:** 16/09/2003  
**Fecha de finalización:** 21/09/2003  
José L. Alonso; Alberto Lesarri; Santiago Mata; Emilio J. Cocinero; Susana Blanco; María E. Sanz; Juan C. López.
- 151 Título del trabajo:** Jet-cooled Rotational Spectra of Biomolecules (57-HT)  
**Nombre del congreso:** XVIII International Conference on Molecular energy Transfer  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Ciudad de celebración:** Madrid, España



**Fecha de celebración:** 15/06/2003

**Fecha de finalización:** 20/06/2003

Alberto Lesarri; Santiago Mata; Emilio J. Cocinero; Susana Blanco; Juan C. López; José L. Alonso.

- 152 Título del trabajo:** Jet-Cooled Rotational Spectra and Structure of Laser-Ablated Amino acids (F2)  
**Nombre del congreso:** XVIIth International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Prague, República Checa  
**Fecha de celebración:** 01/09/2002  
**Fecha de finalización:** 05/09/2002  
Alberto Lesarri; Santiago Mata; Emilio J. Cocinero; Susana Blanco; Juan C. López; José L. Alonso.

- 153 Título del trabajo:** Jet-Cooled Rotational Spectra and Structure of Laser-Ablated Amino acids  
**Nombre del congreso:** International Conference on Laser Probing  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Leuven, Bélgica  
**Fecha de celebración:** 07/07/2002  
**Fecha de finalización:** 12/07/2002  
Alberto Lesarri; Santiago Mata; Emilio J. Cocinero; Juan C. López; José L. Alonso.

- 154 Título del trabajo:** Rotational Spectra and Structure of Proline: a Jet-cooled Laser Ablation Study (RD01)  
**Nombre del congreso:** 57th International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 17/06/2002  
**Fecha de finalización:** 21/06/2002  
**Entidad organizadora:** The Ohio State University   **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América  
Alberto Lesarri; Santiago Mata; Emilio J. Cocinero; Juan C. López; José L. Alonso.

- 155 Título del trabajo:** Weak C-H...O and C-H...F hydrogen bonds in the trifluoromethane...oxirane and difluoromethane...oxirane complexes (FC10)  
**Nombre del congreso:** 57th International Symposium on Molecular Spectroscopy  
**Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Columbus, Estados Unidos de América  
**Fecha de celebración:** 17/06/2002  
**Fecha de finalización:** 21/06/2002  
**Entidad organizadora:** The Ohio State University   **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad organizadora:** Columbus, Estados Unidos de América  
Susana Blanco; Juan C. López; Alberto Lesarri; Sonia Antolínez; Emilio J. Cocinero; José L. Alonso.

- 156 Título del trabajo:** Jet-cooled Rotational Spectroscopy  
**Nombre del congreso:** 5th Iberian Joint Meeting on Atomic & Molecular Physics  
**Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Ciudad de celebración:** Lisbon, Portugal  
**Fecha de celebración:** 23/03/2002



**Fecha de finalización:** 26/03/2002

José L. Alonso; Juan C. López; Alberto Lesarri; Santiago Mata; Susana Blanco; María E. Sanz; Emilio J. Cocinero; Raquel Sánchez.

## Gestión de I+D+i y participación en comités científicos

### Comités científicos, técnicos y/o asesores

- Título del comité:** Agencia Nacional de Evaluación y Prospectiva (ANEP)  
**Primaria (Cód. Unesco):** 230000 - Química  
**Entidad de afiliación:** Ministerio de Ciencia e Innovación. Investigación  
**Tipo de entidad:** MICCIN  
**Fecha de inicio-fin:** 2011 - 2020
- Título del comité:** Flygare Award Committee, International Division on Molecular Spectroscopy  
**Entidad de afiliación:** International Division on Molecular Spectroscopy  
**Tipo de entidad:** IDMS  
**Fecha de inicio-fin:** 2016 - 2018
- Título del comité:** Grupo Especializado de Jóvenes Investigadores Químicos - Premios SusCHEM  
**Entidad de afiliación:** Real Sociedad Española de Química  
**Tipo de entidad:** Publica  
**Fecha de inicio-fin:** 2014 - 2017
- Título del comité:** National Authority for Scientific Research (ANCS)  
**Primaria (Cód. Unesco):** 230000 - Química  
**Entidad de afiliación:** Ministry of Education, Research, Youth and Sports  
**Fecha de inicio-fin:** 2012 - 2012

### Organización de actividades de I+D+i

- Título de la actividad:** X SPANISH DRUG DISCOVERY NETWORK MEETING  
**Tipo de actividad:** Miembro del Comité organizador. **Ámbito geográfico:** Nacional  
**Entidad convocante:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad convocante:** Bilbao, País Vasco, España  
**Fecha de inicio-fin:** 22/11/2018 - 23/11/2018 **Duración:** 4 días
- Título de la actividad:** The 25th International Conference on High Resolution Molecular Spectroscopy  
**Tipo de actividad:** Presidente del congreso. **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
Miembro del Comité científico. Miembro del Comité organizador.  
**Entidad convocante:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad convocante:** Bilbao, País Vasco, España  
**Fecha de inicio-fin:** 03/09/2018 - 07/09/2018 **Duración:** 4 días
- Título de la actividad:** 73rd International Symposium on Molecular Spectroscopy, Illinois  
**Tipo de actividad:** International Advisory Committee **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Entidad convocante:** Universidad de Illinois  
**Ciudad entidad convocante:** Illinois, Estados Unidos de América



**Fecha de inicio-fin:** 18/06/2018 - 22/06/2018

**Duración:** 4 días

- 4** **Título de la actividad:** XIV Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich  
**Tipo de actividad:** Secretario del Comité científico **Ámbito geográfico:** Nacional  
**Entidad convocante:** Universidad de Extremadura **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad convocante:** Badajoz, País Vasco, España  
**Fecha de inicio-fin:** 07/11/2017 - 10/11/2017 **Duración:** 4 días
- 5** **Título de la actividad:** 72nd International Symposium on Molecular Spectroscopy, Illinois  
**Tipo de actividad:** International Advisory Committee **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Entidad convocante:** Universidad de Illinois  
**Ciudad entidad convocante:** Illinois, Estados Unidos de América  
**Fecha de inicio-fin:** 19/06/2017 - 23/06/2017 **Duración:** 4 días
- 6** **Título de la actividad:** XIII Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich  
**Tipo de actividad:** Secretario del Comité científico **Ámbito geográfico:** Nacional  
**Entidad convocante:** Universidad de La Rioja **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad convocante:** Logroño, País Vasco, España  
**Fecha de inicio-fin:** 08/11/2016 - 11/11/2016 **Duración:** 4 días
- 7** **Título de la actividad:** 71st International Symposium on Molecular Spectroscopy, Illinois  
**Tipo de actividad:** International Advisory Committee **Ámbito geográfico:** Internacional no UE  
**Entidad convocante:** Universidad de Illinois  
**Ciudad entidad convocante:** Illinois, Estados Unidos de América  
**Fecha de inicio-fin:** 20/06/2016 - 24/06/2016 **Duración:** 4 días
- 8** **Título de la actividad:** XII Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich  
**Tipo de actividad:** Secretario del Comité científico **Ámbito geográfico:** Nacional  
**Entidad convocante:** Universitat de Barcelona **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad convocante:** Barcelona, País Vasco, España  
**Fecha de inicio-fin:** 03/11/2015 - 06/11/2015 **Duración:** 4 días
- 9** **Título de la actividad:** XI Simposio de Investigadores Jóvenes RSEQ - Sigma Aldrich  
**Tipo de actividad:** Presidente del congreso. **Ámbito geográfico:** Nacional  
Miembro del Comité científico. Miembro del Comité organizador.  
**Entidad convocante:** Universidad del País Vasco **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad convocante:** Bilbao, País Vasco, España  
**Fecha de inicio-fin:** 04/11/2014 - 07/11/2014 **Duración:** 4 días

## Gestión de I+D+i

- 1** **Nombre de la actividad:** Sección Territorial del País Vasco  
**Tipología de la gestión:** Gestión de entidad  
**Funciones desempeñadas:** Vocal de la Sección Territorial  
**Entidad de realización:** Real Sociedad Española de **Tipo de entidad:** R  
Química  
**Fecha de inicio:** 04/11/2016 **Duración:** 3 años - 2 meses



- 2** **Nombre de la actividad:** Grupo Espacializado de Jóvenes Investigadores  
**Tipología de la gestión:** Gestión de entidad  
**Funciones desempeñadas:** Presidente del Grupo especializado  
**Entidad de realización:** Real Sociedad Española de Química **Tipo de entidad:** RSEQ  
**Fecha de inicio:** 04/11/2014 **Duración:** 3 años
- 3** **Nombre de la actividad:** Real Sociedad Española de Química  
**Tipología de la gestión:** Gestión de entidad  
**Funciones desempeñadas:** Vocal de la Junta  
**Entidad de realización:** Real Sociedad Española de Química **Tipo de entidad:** R  
**Fecha de inicio:** 04/11/2014 **Duración:** 3 años
- 4** **Nombre de la actividad:** Grupo Espacializado de Jóvenes Investigadores  
**Tipología de la gestión:** Gestión de entidad  
**Funciones desempeñadas:** Vocal de la Junta directiva  
**Entidad de realización:** Real Sociedad Española de Química **Tipo de entidad:** RSEQ  
**Fecha de inicio:** 04/11/2013 **Duración:** 1 año

## Otros méritos

### Estancias en centros de I+D+i públicos o privados

- 1** **Entidad de realización:** Institut des sciences moléculaires d'Orsay  
**Ciudad entidad realización:** París, Francia  
**Fecha de inicio-fin:** 21/10/2019 - 28/10/2019 **Duración:** 8 días
- 2** **Entidad de realización:** Università di Bologna  
**Ciudad entidad realización:** Bolonia, Italia  
**Fecha de inicio-fin:** 30/08/2019 - 06/09/2019 **Duración:** 8 días
- 3** **Entidad de realización:** Institut des sciences moléculaires d'Orsay  
**Ciudad entidad realización:** París, Francia  
**Fecha de inicio-fin:** 25/09/2018 - 03/10/2018 **Duración:** 10 días
- 4** **Entidad de realización:** Institut für Physikalische & Elektrochemie **Tipo de entidad:** Instituto Universitario de Investigación  
**Ciudad entidad realización:** Hannover, Alemania  
**Fecha de inicio-fin:** 01/08/2005 - 30/09/2005 **Duración:** 2 meses
- 5** **Entidad de realización:** Università di Bologna  
**Ciudad entidad realización:** Bolonia, Italia  
**Fecha de inicio:** 26/11/2013 **Duración:** 15 días
- 6** **Entidad de realización:** Institut des sciences moléculaires d'Orsay  
**Ciudad entidad realización:** París, Francia  
**Fecha de inicio:** 15/10/2012 **Duración:** 21 días



- 7** **Entidad de realización:** University of Virginia  
**Ciudad entidad realización:** Charlottesville, Estados Unidos de América  
**Fecha de inicio:** 22/06/2012 **Duración:** 21 días
- 8** **Entidad de realización:** FELIX, FOM – Institute for Plasma Physics  
**Ciudad entidad realización:** Nieuwegein, Holanda  
**Fecha de inicio:** 01/11/2011 **Duración:** 2 meses
- 9** **Entidad de realización:** Institut für Physikalische & Elektrochemie  
**Ciudad entidad realización:** Hannover, Alemania **Tipo de entidad:** Instituto Universitario de Investigación  
**Fecha de inicio:** 14/07/2011 **Duración:** 1 mes - 14 días
- 10** **Entidad de realización:** FELIX, FOM – Institute for Plasma Physics  
**Ciudad entidad realización:** Nieuwegein, Holanda  
**Fecha de inicio:** 16/05/2010 **Duración:** 2 meses
- 11** **Entidad de realización:** Physical and Theoretical Chemistry Laboratories  
**Ciudad entidad realización:** Oxford, Reino Unido  
**Fecha de inicio:** 30/03/2010 **Duración:** 14 días
- 12** **Entidad de realización:** Physical and Theoretical Chemistry Laboratories  
**Ciudad entidad realización:** Oxford, Reino Unido  
**Fecha de inicio:** 01/05/2009 **Duración:** 1 mes - 14 días
- 13** **Entidad de realización:** Physical and Theoretical Chemistry Laboratories  
**Ciudad entidad realización:** Oxford, Reino Unido  
**Fecha de inicio:** 01/06/2008 **Duración:** 5 meses
- 14** **Entidad de realización:** FELIX, FOM – Institute for Plasma Physics  
**Ciudad entidad realización:** Nieuwegein, Holanda  
**Fecha de inicio:** 07/05/2007 **Duración:** 7 días
- 15** **Entidad de realización:** Commissariat à l'Energie Atomique (CEA)  
**Ciudad entidad realización:** Saclay, Francia  
**Fecha de inicio:** 05/06/2006 **Duración:** 14 días
- 16** **Entidad de realización:** Physical and Theoretical Chemistry Laboratories  
**Ciudad entidad realización:** Oxford, Reino Unido  
**Fecha de inicio:** 01/06/2006 **Duración:** 2 años



## Redes de cooperación

- 1 Nombre de la red:** Grupo Especializado de Química Biológica  
**Identificación de la red:** GE-QB  
**Fecha de inicio:** 01/03/2013
- 2 Nombre de la red:** Royal Society of Chemistry  
**Fecha de inicio:** 01/03/2013
- 3 Nombre de la red:** Grupo Especializado Jóvenes Químicos  
**Identificación de la red:** JIQ  
**Fecha de inicio:** 01/03/2011
- 4 Nombre de la red:** Grupo Especializado de Física Atómica y Molecular  
**Identificación de la red:** GE-FAM  
**Fecha de inicio:** 01/03/2009
- 5 Nombre de la red:** Real Sociedad Española de Química  
**Identificación de la red:** RSEQ  
**Fecha de inicio:** 01/03/2009

## Premios, menciones y distinciones

- 1 Descripción:** International Dr. Barbara Mez-Starck Prize  
**Entidad concesionaria:** Barbara Mez-Starck Foundation  
**Tipo de entidad:** BMSF  
**Ciudad entidad concesionaria:** Ulm, Alemania  
**Fecha de concesión:** 2018  
**Reconocimientos ligados:** First Spanish to get this recognition. For his extensive investigations of conformational behaviours and precise molecular structures of amino acids, sugars, alkaloids, anaesthetics and nicotinoids.
- 2 Descripción:** Premio ENRIQUE PÉREZ-PAYÁ  
**Entidad concesionaria:** SOCIEDAD ESPAÑOLA DE BIOFISICA  
**Tipo de entidad:** SBE  
**Ciudad entidad concesionaria:** España  
**Fecha de concesión:** 2017  
**Reconocimientos ligados:** For outstanding contributions in molecular spectroscopy by early career independent scientist
- 3 Descripción:** Premio FLYGARE  
**Entidad concesionaria:** International Division on Molecular Spectroscopy, USA  
**Ciudad entidad concesionaria:** Illinois, Estados Unidos de América  
**Fecha de concesión:** 2015  
**Reconocimientos ligados:** For outstanding contributions in molecular spectroscopy by early career independent scientist.



- 4 Descripción:** Premio POSTDOC SusChem Jóvenes Investigadores Químicos  
**Entidad concesionaria:** Plataforma Tecnológica de Química Sostenible (SusChem-ES) **Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones  
**Fecha de concesión:** 2012  
**Reconocimientos ligados:** The best scientific publication in 2011 conducted by a Spanish young researcher in any area of Chemistry.
- 5 Descripción:** Premio SIGMA-ALDRICH a Investigadores noveles de la RSEQ (Real Sociedad Española de Química)  
**Entidad concesionaria:** Real Sociedad Española de Química **Tipo de entidad:** Sociedad  
**Fecha de concesión:** 2012  
**Reconocimientos ligados:** The best scientific career of a Spanish young researcher in any area of Chemistry
- 6 Descripción:** Premio Extraordinario de Doctorado  
**Entidad concesionaria:** Universidad de Valladolid **Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de concesión:** 2008  
**Reconocimientos ligados:** Mejor Tesis realizada en la Universidad de Valladolid durante el curso académico 2004-2005