



LOURDES GRACIA EDO

Generado desde: Universitat de València

Fecha del documento: 31/10/2025

v 1.4.0

82923db847ab6125ea68bba591bff2f7

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/>

LOURDES GRACIA EDO

Apellidos: **GRACIA EDO**
Nombre: **LOURDES**
DNI: **52942227E**
ORCID: **0000-0001-9684-2568**
ResearcherID: **A-7978-2013**
ScopusID: **6603803796**
Fecha de nacimiento: **28/03/1978**
Sexo: **Mujer**
Nacionalidad: **España**
País de nacimiento: **España**
Dirección de contacto: **Departament de Química Física. Universitat de València**
Código postal: **46100**
País de contacto: **España**
Ciudad de contacto: **Burjassot**
Teléfono fijo: **963543343 - 43343**
Correo electrónico: **lourgrae@uv.es**

Situación profesional actual

Entidad empleadora: Universitat de València
Departamento: FACULTAD DE QUÍMICA, QUÍMICA FÍSICA
Categoría profesional: TITULAR DE UNIVERSIDAD
Ciudad entidad empleadora: Burjassot, España
Teléfono: 963543343 - 43343 **Correo electrónico:** lourgrae@uv.es
Fecha de inicio: 16/11/2020
Modalidad de contrato: Funcionario/a **Régimen de dedicación:** Tiempo completo
Primaria (Cód. Unesco): 221000 - Química física
Funciones desempeñadas: CUMPLIMENTE LA DEDICACIÓN PROFESIONAL EN EL APARTADO DE TEXTOS DEL CURRÍCULUM

Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
1	Universitat de València	Profesor Ayudante Doctor	19/09/2016
2	Universitat Jaume I	Personal Investigador Contratado Doctor	19/02/2014
3	Instituto de Química. Universidade Federal de São Carlos. Brasil	Ayuda PostDoctoral de CNPq	01/04/2013
4	Universitat Jaume I	Personal Investigador Contratado Doctor	01/11/2012
5	Universitat Jaume I	Ayuda Postdoctoral Ministerio de Educación y Ciencia:CONSOLIDER-INGENIO. Proyecto MALTA	01/07/2009
6	Universitat de València	Profesor Asociado	10/01/2011

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
7	Universitat Jaume I	Ayuda Postdoctoral en centros de Investigación de Excelencia de la Comunidad Valenciana (APOSTD/2007	01/07/2007
8	Universitat Jaume I	Beca de Continuidad de la Actividad Investigadora	01/07/2005
9	Universitat Jaume I	Becaria predoctoral FPI del Ministerio de Ciencia y Tecnología	01/07/2001
10	Universitat Jaume I	Beca (Fundación Bancaixa)	01/01/2001

- Entidad empleadora:** Universitat de València
Categoría profesional: Profesor Ayudante Doctor
Fecha de inicio-fin: 19/09/2016 - 15/11/2020 **Duración:** 4 años - 1 mes - 28 días
- Entidad empleadora:** Universitat Jaume I
Categoría profesional: Personal Investigador Contratado Doctor
Fecha de inicio-fin: 19/02/2014 - 19/09/2016 **Duración:** 2 años - 7 meses - 1 día
- Entidad empleadora:** Instituto de Química. Universidade Federal de São Carlos. Brasil
Categoría profesional: Ayuda PostDoctoral de CNPq
Fecha de inicio-fin: 01/04/2013 - 28/02/2014 **Duración:** 11 meses
- Entidad empleadora:** Universitat Jaume I
Categoría profesional: Personal Investigador Contratado Doctor
Fecha de inicio-fin: 01/11/2012 - 06/03/2013 **Duración:** 4 meses - 6 días
- Entidad empleadora:** Universitat Jaume I
Categoría profesional: Ayuda Postdoctoral Ministerio de Educación y Ciencia:CONSOLIDER-INGENIO. Proyecto MALTA
Fecha de inicio-fin: 01/07/2009 - 20/10/2012 **Duración:** 3 años - 3 meses - 20 días
- Entidad empleadora:** Universitat de València
Categoría profesional: Profesor Asociado
Fecha de inicio-fin: 10/01/2011 - 10/04/2011 **Duración:** 3 meses - 1 día
- Entidad empleadora:** Universitat Jaume I
Categoría profesional: Ayuda Postdoctoral en centros de Investigación de Excelencia de la Comunidad Valenciana (APOSTD/2007
Fecha de inicio-fin: 01/07/2007 - 30/06/2009 **Duración:** 2 años
- Entidad empleadora:** Universitat Jaume I
Categoría profesional: Beca de Continuidad de la Actividad Investigadora
Fecha de inicio-fin: 01/07/2005 - 30/06/2007 **Duración:** 2 años
- Entidad empleadora:** Universitat Jaume I
Categoría profesional: Becaria predoctoral FPI del Ministerio de Ciencia y Tecnología
Fecha de inicio-fin: 01/07/2001 - 30/06/2005 **Duración:** 4 años



10 **Entidad empleadora:** Universitat Jaume I
Categoría profesional: Beca (Fundación Bancaixa)
Fecha de inicio-fin: 01/01/2001 - 01/07/2001 **Duración:** 6 meses - 1 día



Formación académica recibida

Titulación universitaria

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

Titulación universitaria: Diplomatura / Licenciatura / Grado

Nombre del título: Licenciatura Química

Entidad de titulación: Universitat Jaume I

Fecha de titulación: 06/10/2000

Doctorados

Entidad de titulación: Universitat Jaume I

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de titulación: 23/06/2005

Título de la tesis: ESTUDIOS TEÓRICOS DE ESTRUCTURAS CRISTALINAS Y ÓXIDOS METÁLICOS. EFECTO DE LA PRESIÓN, PROCESOS DE DIFUSIÓN Y REACTIVIDAD QUÍMICA

Director/a de tesis: Juan Andrés Bort; Armando Beltrán Flors

Otra formación universitaria de posgrado

Tipo de formación: Postgrado

Titulación de posgrado: Formación Especializada - Diploma de Estudios Avanzados (DEA)

Facultad, instituto, centro: Universitat Jaume I

Fecha de titulación: 07/02/2003

Conocimiento de idiomas

Idioma	Comprensión auditiva	Comprensión de lectura	Interacción oral	Expresión oral	Expresión escrita
Catalán	C2	C2	C2	C2	C2
Inglés	B2	B2	B2	B2	B2
Francés	B1	B1	B1	B1	B2



Actividad docente

Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

- 1** **Título del trabajo:** Surface chemistry of SnO₂ through first-principles calculations
Tipo de proyecto: Trabajo de Master o de Tercer ciclo de 12 o más créditos
Entidad de realización: Universitat de València
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Eduardo Ortega de los Ríos
Calificación obtenida: Sobresaliente
Fecha de defensa: 2023
- 2** **Título del trabajo:** Estudio teórico del mecanismo dual de la fructosa-1,6bifosfato aldolasa/fosfatasa
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Entidad de realización: Universitat de València
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Valentín Gradisteanu
Calificación obtenida: Sobresaliente
Fecha de defensa: 2022
- 3** **Título del trabajo:** Estudio teórico de la oxidación de metanol utilizando óxido de vanadio soportado como catalizador
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Entidad de realización: Universitat de València
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Sofía Hidalgo Casal García
Calificación obtenida: Notable
Fecha de defensa: 2022
- 4** **Título del trabajo:** Estudio teórico de la catálisis por agua de la reacción del NH₃ con MO⁺
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Entidad de realización: Universitat de València
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Álvaro Royo de Larios
Fecha de defensa: 2022
- 5** **Título del trabajo:** Reciclaje de desechos plásticos
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Entidad de realización: Universitat de València
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Jimena Jiménez Rodrigo
Calificación obtenida: Notable
Fecha de defensa: 2022
- 6** **Título del trabajo:** Investigacao Teórico-Experimental do Efeito da Dopagem nas Propriedades Estruturais e Eletrônicas do Óxido de Índio
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral



Entidad de realización: Universidade Federal de Uberlândia, Brasil
Ciudad entidad realización: Brasil
Alumno/a: Samantha Custódio Silva Lemos
Calificación obtenida: Sobresaliente cum laude
Fecha de defensa: 2021

- 7 Título del trabajo:** Doping and phase transitions processes on semiconductors and vibrational properties in complex glasses: A theoretical and experimental investigation
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Entidad de realización: Universitat Jaume I
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Eduardo de Oliveira Gomes
Calificación obtenida: Sobresaliente cum laude
Fecha de defensa: 2021

- 8 Título del trabajo:** Estudio Teórico de la Catálisis por Agua de Procesos Tautoméricos
Tipo de proyecto: Trabajo Fin de Grado
Entidad de realización: Universitat de València
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Elena Martínez Bautista
Calificación obtenida: Notable
Fecha de defensa: 2020

- 9 Título del trabajo:** Morfología y propiedades estructurales de óxidos metálicos complejos: un enfoque teórico y experimental
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Entidad de realización: Jaume I
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Marisa Carvalho de Oliveira
Calificación obtenida: Sobresaliente cum laude
Fecha de defensa: 2018

Participación en proyectos de innovación docente

Título del proyecto: Cómo se puede favorecer el aprendizaje en las sesiones prácticas de química-física al laboratorio
Tipo de participación: Miembro de equipo
Tipo duración relación laboral: De duración indeterminada o indefinida
Nombre del investigador/a principal (IP): Marta feliz
Entidad financiadora: Universitat Jaume I
Entidad/es participante/s: Universitat Jaume I
Tipo de convocatoria: Competitivo
Fecha de inicio-fin: 19/02/2004 - 30/07/2004
Tipo de entidad: Otros organismos
Tipo de entidad: Otros organismos
Duración: 5 meses - 12 días

Participación en congresos con ponencias orientadas a la formación docente

- 1 Nombre del evento:** INDOQUIM. Innovación Docente en Química 2023
Tipo de evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Valencia, España
Fecha de presentación: 2023
Tutoría de prácticas académicas externas y cooperación con secundaria.
- 2 Nombre del evento:** ESCUELA ESPAÑOLA DE ALTAS PRESIONES 2021
Tipo de evento: Congreso
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: España
Fecha de presentación: 2021
Calculation of equations of state, thermodynamic properties and phase transitions in SnO₂.

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:** Estudio combinado teórico-experimental sobre la transformación sostenible de sustratos orgánicos catalizada por óxidos y sulfuros de molibdeno y wolframio
Entidad de realización: Universitat de València **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Desconocido
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Andrés Bort y Rosa Llusar Barelles
Entidad/es financiadora/s:
MINISTERIO DE CIENCIA, INNOVACIÓN Y UNIVERSIDADES **Tipo de entidad:** Administraciones Públicas
Ciudad entidad financiadora: España
Cód. según financiadora: PID2022-141089NB-I00
Fecha de inicio-fin: 01/09/2023 - 31/08/2026 **Duración:** 3 años
Entidad/es participante/s: Universitat Jaume I
Cuantía total: 150.000 €
- 2 Nombre del proyecto:** Diseño de nuevos catalizadores polimetálicos para la transformación sostenible de sustratos orgánicos combinando teoría y experimento (DICATPOL)
Entidad de realización: Universitat de València **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: Desconocido
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Andrés Bort y Rosa Llusar Barelles
Entidad/es financiadora/s:
Conselleria d'Innovació, Universitats, Ciència i Societat Digital de la Generalitat Valenciana **Tipo de entidad:** Comunidades Autónomas



Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: CIAICO/2021/122

Fecha de inicio-fin: 01/01/2022 - 31/12/2024

Duración: 3 años

Entidad/es participante/s: Universitat Jaume I

Cuantía total: 79.500 €

- 3 Nombre del proyecto:** Aproximaciones racionales para el diseño de nuevos materiales mediante la combinación de teoría y experimento. Rational Approaches toward the Design of New Materials by Combining Theory and Experiment (APDEMAT_THEOEXP)

Entidad de realización: Universitat de València

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: Desconocido

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Andrés Bort y Rosa Llusar Barelles

Nº de investigadores/as: 6

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Economía y Competitividad

Tipo de entidad: Ministerios

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: PGC2018-094417-B-I00

Fecha de inicio-fin: 01/01/2019 - 30/06/2022

Duración: 3 años - 6 meses

Entidad/es participante/s: Universitat Jaume I

Cuantía total: 114.950 €

- 4 Nombre del proyecto:** PROGRAMA GRUPS D'INVESTIGACIO ACTIUS EN CAPTACIÓ DE RECURSOS PLA ESTATAL I+D+I CODI GRUP 024

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Tipo de entidad: Otros organismos

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Andrés Bort

Entidad/es financiadora/s:

Universitat Jaume I

Tipo de entidad: Otros organismos

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: GACUJI/2019/08

Fecha de inicio-fin: 01/01/2019 - 31/12/2019

Duración: 1 año

Entidad/es participante/s: Universitat Jaume I

Cuantía total: 6.266,7 €

- 5 Nombre del proyecto:** Caminos de mínima energía libre en reacciones enzimáticas. Aplicación a la CASPASA-1

Entidad de realización: Universitat de València

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: Desconocido

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Iñaki Tuñón

Nº de investigadores/as: 3

Entidad/es financiadora/s:

Generalitat Valenciana

Tipo de entidad: Comunidades Autónomas

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: AICO/2018/238

Fecha de inicio-fin: 01/01/2018 - 31/12/2019

Duración: 2 años

Entidad/es participante/s: Universitat de València

Cuantía total: 39.200 €

- 6** **Nombre del proyecto:** Diseño racional de materiales a escala micro, nano y clúster basados en metales del grupo seis para aplicaciones en catálisis y fotocatalisis mediante combinación de teoría y experimentos
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Otros organismos
Ciudad entidad realización: España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Manuel Andrés Bort
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Economía y Competitividad **Tipo de entidad:** Ministerios
Ciudad entidad financiadora: España
Cód. según financiadora: CTQ2015-65207-P
Fecha de inicio-fin: 01/03/2016 - 31/12/2018 **Duración:** 2 años - 10 meses
Entidad/es participante/s: Universitat Jaume I
Cuantía total: 87.145 €
- 7** **Nombre del proyecto:** Simulaciones Moleculares en Catálisis. Desarrollos Metodológicos y Aplicaciones en Biocatálisis y Nanomateriales (SIMONANO)
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Otros organismos
Ciudad entidad realización: España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Andrés Bort
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Economía y Competitividad **Tipo de entidad:** Ministerios
Ciudad entidad financiadora: España
Cód. según financiadora: CTQ2012-36253-C03-02
Fecha de inicio-fin: 01/01/2013 - 31/12/2015 **Duración:** 3 años
Entidad/es participante/s: Universitat Jaume I
Cuantía total: 50.310 €
- 8** **Nombre del proyecto:** Modelización computacional de la catálisis biológica. Aplicaciones en biomedicina y biotecnología.
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Otros organismos
Ciudad entidad realización: España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Vicente Moliner Ibáñez
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Economía y Competitividad **Tipo de entidad:** Ministerios
Ciudad entidad financiadora: España
Cód. según financiadora: ctq2009-14541-CO2- 01/BQU
Fecha de inicio-fin: 01/01/2010 - 31/12/2012 **Duración:** 3 años
Entidad/es participante/s: Universitat Jaume I
Cuantía total: 247.324 €
- 9** **Nombre del proyecto:** Estructura, estabilidad y propiedades de óxidos metálicos mixtos con estructura ABO₃ y ABO₄ a alta presión
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Otros organismos
Ciudad entidad realización: España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Armando Beltrán Flors
Entidad/es financiadora/s:
Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Otros organismos
Ciudad entidad financiadora: España
Cód. según financiadora: P1.1B2009-08
Fecha de inicio-fin: 15/12/2009 - 14/12/2012 **Duración:** 3 años



Entidad/es participante/s: Universitat Jaume I
Cuantía total: 31.000 €

- 10 Nombre del proyecto:** Grupo Español de altas presiones - Materia a Alta Presión (MALTA)
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Otros organismos
Ciudad entidad realización: España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Andrés Bort
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Educación y Ciencia. **Tipo de entidad:** Otros organismos
Consolider-Ingenio2010
Ciudad entidad financiadora: Desconocido
Cód. según financiadora: CSD2007-00045
Fecha de inicio-fin: 01/10/2007 - 30/09/2012 **Duración:** 5 años
Entidad/es participante/s: Universidad Complutense de Madrid
Cuantía total: 123.480 €

- 11 Nombre del proyecto:** Estudios teóricos computacionales de sistemas químicos en fases condensadas. Cálculos QM/MM de reacciones en sistemas biológicos y en sólidos.
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Otros organismos
Ciudad entidad realización: España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Vicente Moliner Ibáñez
Entidad/es financiadora/s:
Generalitat Valenciana **Tipo de entidad:** Comunidades Autónomas
Ciudad entidad financiadora: España
Cód. según financiadora: ACOMP/2011/038
Fecha de inicio-fin: 01/01/2011 - 31/12/2011 **Duración:** 1 año
Entidad/es participante/s: Universitat Jaume I
Cuantía total: 5.000 €

- 12 Nombre del proyecto:** Modelización computacional de la catálisis biológica. Aplicaciones en biomedicina y biotecnología
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Otros organismos
Ciudad entidad realización: España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Andrés Bort
Entidad/es financiadora/s:
Generalitat Valenciana **Tipo de entidad:** Comunidades Autónomas
Ciudad entidad financiadora: España
Cód. según financiadora: ACOMP/2009/121
Fecha de inicio-fin: 01/01/2009 - 31/12/2009 **Duración:** 1 año
Entidad/es participante/s: Universitat Jaume I
Cuantía total: 10.000 €

- 13 Nombre del proyecto:** Estudios teóricos computacionales de sistemas químicos en fases condensadas. Cálculos QM/MM de reacciones en sistemas biológicos y en sólidos.
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Otros organismos
Ciudad entidad realización: España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Andrés Bort
Entidad/es financiadora/s:
MEC - Ministerio de Educación y Ciencia **Tipo de entidad:** Otros organismos
Ciudad entidad financiadora: Desconocido



Cód. según financiadora: CTQ2006-15447-C02-01

Fecha de inicio-fin: 01/10/2006 - 30/09/2009

Duración: 3 años

Entidad/es participante/s: Universitat Jaume I

Cuantía total: 72.600 €

- 14 Nombre del proyecto:** Estudio teórico de la respuesta de los óxidos de wolframio, titanio y estaño a la inserción y/o difusión de iones alcalinos

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Tipo de entidad: Otros organismos

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Armando Beltrán Flors

Entidad/es financiadora/s:

Universitat Jaume I

Tipo de entidad: Otros organismos

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: P1·1B2005-20

Fecha de inicio-fin: 01/12/2005 - 30/11/2008

Duración: 3 años

Entidad/es participante/s: Universitat Jaume I

Cuantía total: 18.900 €

Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1** Josiane C. Souza; Samantha C. S. Lemos; Marcelo Assis; Carlos H. M. Fernandes; Lara K. Ribeiro; Yeison Núñez-de la Rosa; Márcio D. Teodoro; Lourdes Gracia; Juan Andrés; Lucia H. Mascaro; Elson Longo. Boosted Photocatalytic Activities of Ag₂CrO₄ through Eu³⁺-Doping Process. *Acs Omega*. 9 - 33, pp. 35537 - 35547. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2024. ISSN 2470-1343
DOI: <https://doi.org/10.1021/acsomega.4c02683>
Handle: <https://hdl.handle.net/10550/109012>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 11
- 2** Marisa C. Oliveira; Elson Longo; Renan A. P. Ribeiro; Samantha C. S. Lemos; Juan Andrés; Lourdes Gracia. First-principles study on the stability, electronic structure, and band alignment of AgNbO₃ surfaces: Understanding the adsorption process of H₂O and O₂. *Computational Materials Science*. 246 - 113398, pp. 1 - 30. (Holanda): 2024. ISSN 0927-0256
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2024.113398>
Handle: <https://hdl.handle.net/10550/109001>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 6
- 3** Daniela E. Ortega; Lourdes Gracia; Diego Cortés-Arriagada. How does the SiO₂-supported nickel catalyst improve the ethylenepolymerization process? Insights from DFT studies. *Molecular Catalysis*. 549 - 113509, (Holanda): 2023. ISSN 2468-8231
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.mcat.2023.113509>

Handle: <https://hdl.handle.net/10550/97106>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.9

Posición de publicación: 73

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 178

- 4** Felipe Lipsky; Luis H. S. Lacerda; Lourdes Gracia; Beatriz G. Foschiani; Marcelo Assis; Mónica Oliva; Elson Longo; Juan Andrés; Miguel A. San-Miguel. A Tale of Reactive Oxygen Species on the Ag₃PO₄(110) Surface. Journal of physical chemistry. C.127 - 48, pp. 23235 - 23245. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2023. ISSN 1932-7447

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.3c06321>

Handle: <https://hdl.handle.net/10550/98157>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.3

Posición de publicación: 82

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 178

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.3

Posición de publicación: 196

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 439

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.3

Posición de publicación: 79

Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 141

- 5** R. A. C. Amoresi; R. C. de Oliveira; L. Cichetto Jr.; P. M. Desimone; C. M. Aldao; M. A. Ponce; L. Gracia; J. R. Sambrano; E. Longo; J. Andres; A. Z. Simoes. Pure and Ni₂O₃-decorated CeO₂ nanoparticles applied as CO gas sensor: Experimental and theoretical insights. Ceramics International. 48, pp. 14025. (Reino Unido): 2022. ISSN 0272-8842

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2022.01.286>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.2

Posición de publicación: 3

Tipo de soporte: Revista

Categoría: MATERIALS SCIENCE, CERAMICS

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 29

- 6** M. M. Teixeira; L. C. Santos; A. C. M. Tello; P. B. Almeida; J. S. da Silva; L. Laier; L. Gracia; M. D. Teodoro; L. F. da Silva; J. Andrés; E. Longo. α - Ag₂WO₄ under microwave, electron beam and femtosecond laser irradiations: Unveiling the relationship between morphology and photoluminescence emissions. Journal of Alloys and Compounds. 903, pp. 163840. (Suiza): 2022. ISSN 0925-8388

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2022.163840>

Handle: <https://hdl.handle.net/10550/104983>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Nº total de autores: 11

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 6.2

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 45**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 6.2**Posición de publicación:** 91**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 6.2**Posición de publicación:** 8**Num. revistas en cat.:** 161**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 344**Categoría:** METALLURGY & METALLURGICAL ENGINEERING**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 79

- 7** S. C. S. Lemos; T. K. L. Rezende; M. Assis; F. C. Romeiro; D. A. Peixoto; E. O. Gomes; G. M. Jacobsen; M. D. Teodoro; L. Gracia; J. L. Ferrari; E. Longo; J. Andrés; R. C. de Lima. Efficient Ni and Fe doping process in ZnO with enhanced photocatalytic activity: A theoretical and experimental investigation. Materials Research Bulletin. 152, pp. 111849. (Estados Unidos de América): Elsevier, 2022. ISSN 0025-5408

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2022.111849>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 5.4**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 108**Num. revistas en cat.:** 344

- 8** E. O. Gomes; A. F. Gouveia; L. Gracia; A. Lobato; J. M. Recio; J. Andrés. A Chemical-Pressure-Induced Phase Transition Controlled by Lone Electron Pair Activity. Journal Of Physical Chemistry Letters. 13 - 42, pp. 9883 - 9888. (Estados Unidos de América): 2022. ISSN 1948-7185

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.2c02582>**Handle:** <https://hdl.handle.net/10550/104974>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Índice de impacto:** 5.7**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 52**Num. revistas en cat.:** 161**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 5.7**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 99**Num. revistas en cat.:** 344**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Índice de impacto:** 5.7**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 5**Num. revistas en cat.:** 35**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY**Índice de impacto:** 5.7**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 45**Num. revistas en cat.:** 108

- 9** Roman Alvarez-Roca; Amanda Fernandes Gouveia; Camila Cristina de Foggi; Pablo Santana Lemos; Lourdes Gracia; Luís Fernando da Silva; Carlos Eduardo Vergani; Miguel San-Miguel; Elson Longo; Juan Andrés. Selective Synthesis of α -, β -, and γ -Ag₂WO₄ Polymorphs: Promising Platforms for Photocatalytic and Antibacterial Materials. Inorganic Chemistry. 60, pp. 1062 - 1079. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2021. ISSN 0020-1669

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c03186>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 5.436

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 5

Num. revistas en cat.: 46

- 10** Eduardo O. Gomes; Benjamin J.A. Moulton; Thiago R. Cunha; Lourdes Gracia; Paulo S. Pizani; Juan Andrés. Identifying and explaining vibrational modes of sanbornite (low-BaSi₂O₅) and Ba₅Si₈O₂₁: A joint experimental and theoretical study. Spectrochimica Acta Part A-Molecular and Biomolecular Spectroscopy. 248 - 119130, (Reino Unido): 2021. ISSN 1386-1425

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.saa.2020.119130>

Handle: <https://hdl.handle.net/10550/104908>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: SPECTROSCOPY

Índice de impacto: 4.831

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 5

Num. revistas en cat.: 43

- 11** L.X. Lovisa; E. O. Gomes; L. Gracia; A.A.G. Santiago; M. Siu Li; J.Andres; E. Longo; M.R.D. Bomio; F.V. Motta. Integrated experimental and theoretical study on the phase transition and photoluminescent properties of ZrO₂:xTb₃+(x=1, 2, 4 and 8 mol%). Materials Research Bulletin. 145 - 111532, (Estados Unidos de América): Elsevier, 2021. ISSN 0025-5408

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2021.111532>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 5.6

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 110

Num. revistas en cat.: 345

- 12** B. J. A. Moulton; E. O. Gomes; T. R. Cunha; Carsten Doerenkamp; L. Gracia; H. Eckert; J. Andrés; P. S. Pizani. A theoretical and experimental investigation of hetero- versus homo-connectivity in barium silicates.American Mineralogist. 107, pp. 716 - 728. (Estados Unidos de América): 2021. ISSN 0003-004X

DOI: <https://doi.org/10.2138/am-2021-7910>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: MINERALOGY

Índice de impacto: 3.066

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 10

Num. revistas en cat.: 30

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: GEOCHEMISTRY & GEOPHYSICS

Índice de impacto: 3.066

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 39

Num. revistas en cat.: 87

- 13** Daniel Díaz-Anichtchenko; Lourdes Gracia; Daniel Errandonea. Density-functional study of pressure-induced phase transitions and electronic properties of Zn₂V₂O₇. Rsc Advances. 11, pp. 10401 - 10415. (Reino Unido): 2021. ISSN 2046-2069
DOI: <https://doi.org/10.1039/d1ra01413g>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4,036
Posición de publicación: 75
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 179
- 14** Amanda F. Gouveia; Lourdes Gracia; Elson Longo; Miguel A. San-Miguel; Juan Andrés. Modulating the properties of multifunctional semiconductors by means of morphology: Theory meets experiments. Computational Materials Science. 118 - 110217, (Holanda): 2021. ISSN 0927-0256
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110217>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3,572
Posición de publicación: 184
Tipo de soporte: Revista
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 345
- 15** M. Teixeira; Y. G. Gobato; L. Gracia; L. F. da Silva; W. Avansi Jr; M. Assis; R. C de Oliveira; G. A. Prando; J. Andrés; E. Longo. Towards a white-emitting phosphor Ca₁₀V₆O₂₅ based material. Journal of Luminescence. 220, pp. 116990. (Holanda): 2020. ISSN 0022-2313
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2019.116990>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.28
Posición de publicación: 24
Tipo de soporte: Revista
Categoría: OPTICS
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 99
- 16** C. C. De Fogggi; R. C. De Oliveira; M. Assis; M. T. Fabbro; V. R. Mastelaro; C. E. Vergani; L. Gracia; J. Andrés; E. Longo; A. L. Machado. Unvealing the role of β -Ag₂MoO₄ microcrystals to the improvement of antibacterial activity. Materials Science & Engineering C-Materials For Biological Applications. 111, pp. 35. (Holanda): 2020. ISSN 0928-4931
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.msec.2020.110765>
Handle: <https://hdl.handle.net/10550/104978>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 10
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 7.328
Posición de publicación: 7
Tipo de soporte: Revista
Categoría: MATERIALS SCIENCE, BIOMATERIALS
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 40
- 17** E. O. Gomes; L. Gracia; A. A. G. Santiago; R. L. Tranquilin; F. V. Motta; R. A. C. Amoresi; E. Longo; M. R. D. Bomio; J. Andrés. Structure, electronic properties, morphology evolution, and photocatalytic activity in PbMoO₄ and Pb_{1-2x}CaxSrxMoO₄ (x = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4 and 0.5) solid solutions. Physical Chemistry Chemical Physics. 22 - 44, pp. 25891. (Reino Unido): 2020. ISSN 1463-9076
DOI: <https://doi.org/10.1039/D0CP04596A>
Handle: <https://hdl.handle.net/10550/104968>

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 9**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.676**Posición de publicación:** 77**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.676**Posición de publicación:** 8**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 162**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 37

- 18** Amanda F. Gouveia; Lourdes Gracia; Elson Longo; Miguel A. San-Miguel; Juan Andrés. Modulating the properties of multifunctional semiconductors by means of morphology: Theory meets experiments. Computational Materials Science. 188, (Holanda): 2020. ISSN 0927-0256

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110217>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.3**Posición de publicación:** 173**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 335

- 19** Marisa Carvalho Oliveira; Juan Andrés; Lourdes Gracia; Michelle Suzane M.P. de Oliveira; Jose Manuel R. Mercury; Elson Longo; Içamira Costa Nogueira. Geometry, electronic structure, morphology, and photoluminescence emissions of BaW1-xMoxO4 (x=0, 0.25, 0.50, 0.75, and 1) solid solutions: Theory and experiment in concert. Applied Surface Science. 463, pp. 907 - 917. (Holanda): 2019. ISSN 0169-4332

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.08.146>**Handle:** <https://hdl.handle.net/10550/104892>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 6.182**Posición de publicación:** 37**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 6.182**Posición de publicación:** 27**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 6.182**Posición de publicación:** 17**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 6.182**Posición de publicación:** 1**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 159**Categoría:** PHYSICS, APPLIED**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 154**Categoría:** PHYSICS, CONDENSED MATTER**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 69**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, COATINGS & FILMS**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 21

- 20** S. C. S. Lemos; E. Nossol; J. L. Ferrari; E. O. Gomes; J. Andres; L. Gracia; I. Sorribes; R. C. Lima. Joint Theoretical and Experimental Study on the La Doping Process in In_2O_3 : Phase Transition and Electrocatalytic Activity. *Inorganic Chemistry*. 58 - 17, pp. 11738 - 11750. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2019. ISSN 0020-1669
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.9b01728>
Handle: <https://hdl.handle.net/10550/104970>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Nº total de autores: 8
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.825
Posición de publicación: 4
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 45
- 21** Renan A. P. Ribeiro; Marisa C. Oliveira; Alexsandro Gama de Sousa; Maurício R. D. Bomio; Fabiana V. Motta; Lourdes Gracia; Sergio R. de Lazaro; Elson Longo; Juan Andrés. First principle investigation of the exposed surfaces and morphology of $\beta\text{-ZnMoO}_4$. *Journal of Applied Physics*. 126, pp. 235301. (Estados Unidos de América): American Institute of Physics, 2019. ISSN 0021-8979
DOI: <https://doi.org/10.1063/1.5131260>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2,286
Posición de publicación: 70
Tipo de soporte: Revista
Categoría: PHYSICS, APPLIED
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 154
- 22** R. L. Tranquilin; L. X. Lovisa; C. R. R. Almeida; C. A. Paskocimas; M. S. Li; M. C. Oliveira; L. Gracia; J. Andres; E. Longo; F. V. Motta; M. R. D. Bomio. Understanding the White-Emitting CaMoO_4 Co-Doped Eu^{3+} , Tb^{3+} , and Tm^{3+} Phosphor through Experiment and Computation. *Journal of physical chemistry*. C.123, pp. 18536 - 18550. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2019. ISSN 1932-7447
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b04123>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4,189
Posición de publicación: 57
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 159
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4,189
Posición de publicación: 90
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 314
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4,189
Posición de publicación: 44
Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 103
- 23** Marcelo Assis; Marisa Carvalho de Oliveira; Thales Rafael Machado; Nadia Guerra Macedo; João Paulo Campos Costa; Lourdes Gracia; Juan Andrés; Elson Longo. In Situ Growth of Bi Nanoparticles on NaBiO_3 , $\delta\text{-}$, and $\beta\text{-Bi}_2\text{O}_3$ Surfaces: Electron Irradiation and Theoretical Insights. *Journal of physical chemistry*. C.123, pp. 5023 - 5030. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2019. ISSN 1932-7447
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b11566>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4,189
Posición de publicación: 57

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

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4,189
Posición de publicación: 90

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 314

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4,189
Posición de publicación: 44

Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 103

- 24** Armando Beltrán; Lourdes Gracia; Juan Andrés. Polymorphs of ZnV₂O₆ under Pressure: A First-Principle Investigation. Journal of physical chemistry. C.123, pp. 3239 - 3253. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2019. ISSN 1932-7447

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b12515>

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4,189
Posición de publicación: 57

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

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4,189
Posición de publicación: 90

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 314

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4,189
Posición de publicación: 44

Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 103

- 25** R. A. P. Ribeiro; S. R. de Lazaro; L. Gracia; E. Longo; J. Andrés. Theoretical approach for determining the relation between the morphology and surface magnetism of Co₃O₄. Journal of Magnetism and Magnetic Materials. 453, pp. 262 - 267. (Holanda): 2018. ISSN 0304-8853

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2017.11.025>

Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0

Tipo de soporte: Revista

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.683
Posición de publicación: 121

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 293

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.683
Posición de publicación: 29

Categoría: PHYSICS, CONDENSED MATTER
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 68

- 26** Regiane Cristina de Oliveira; Maria Tereza Fabbro; Carlos Eduardo Vergani; Ana Lucia Machado; Lourdes Gracia; Juan Andrés; Elson Longo. α - and β -AgVO₃ polymorphs as photoluminescent materials: An example of temperature-driven synthesis. Ceramics International. 44, pp. 5939 - 5944. (Reino Unido): 2018. ISSN 0272-8842
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2017.12.161>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.45**Posición de publicación:** 2**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, CERAMICS**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 28

- 27** Paula F. S. Pereira; Amanda F. Gouveia; Ivo M. Pinatti; Rosana F. Gonçalves; Regiane C. de Oliveira; Maya D. P. Silva; Ieda L. V. Rosa; Lourdes Gracia; Juan Andrés; Elson Longo. ZnWO₄ nanocrystals: synthesis, morphology, photoluminescence and photocatalytic properties. Physical Chemistry Chemical Physics. 20, pp. 1923 - 1937. (Reino Unido): 2018. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7CP07354B>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.567**Posición de publicación:** 55**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 148**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Índice de impacto:** 3.567**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 9**Num. revistas en cat.:** 36

- 28** L. X. Lovisa; M. C. Oliveira; J. Andres; L. Gracia; M. S. Li; E. Longo; R. L. Tranquilín; C. A. Paskocimas; M. R. D. Bomio; F. V. Motta. Structure, morphology and photoluminescence emissions of ZnMoO₄: Re³⁺ = Tb³⁺ - Tm³⁺ - X Eu³⁺. (x = 1, 1.5, 2, 2.5 and 3 mol%) particles obtained by the sonochemical method. Journal of Alloys and Compounds. 750, pp. 55 - 70. (Suiza): 2018. ISSN 0925-8388

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2018.03.394>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.175**Posición de publicación:** 47**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 148**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 4.175**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 65**Num. revistas en cat.:** 293**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** METALLURGY & METALLURGICAL ENGINEERING**Índice de impacto:** 4.175**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 6**Num. revistas en cat.:** 76

- 29** Nadia G. Macedo; Amanda F. Gouveia; Roman A. Roca; Marcelo Assis; Lourdes Gracia; Juan Andrés; Edson R. Leite; Elson Longo. Surfactant-Mediated Morphology and Photocatalytic Activity of α -Ag₂WO₄ Material. Journal of physical chemistry. C.122, pp. 8667 - 8679. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2018. ISSN 1932-7447

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b01898>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.309**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No

Posición de publicación: 44**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.309**Posición de publicación:** 60**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.309**Posición de publicación:** 34**Num. revistas en cat.:** 148**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 293**Categoría:** NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 94

- 30** Marisa Carvalho Oliveira; Renan A. Pontes Ribeiro; Lourdes Gracia; Sergio R. de Lazaro; Marcelo de Assis; Ieda L. Viana Rosa; Maria Fernanda do C. Gurgel; Monica Oliva; Elson Longo; Juan Andrés. Experimental and theoretical study of the energetic, morphological, and photoluminescence properties of CaZrO₃:Eu³⁺. Crystengcomm. 20, pp. 5519 - 5530. (Reino Unido): 2018. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/C8CE00964C>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.382**Posición de publicación:** 58**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.382**Posición de publicación:** 6**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 172**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 26

- 31** Mayara Teixeira; Regiane Oliveira; Marisa Carvalho Oliveira; Renan Ribeiro; Sergio R. de Lazaro; Máximo Li; Adenilson J. Chiquito; Lourdes Gracia; Juan Andrés; Elson Longo. Computational Chemistry Meets Experiments for Explaining the Geometry, Electronic Structure, and Optical Properties of Ca₁₀V₆O₂₅. Inorganic Chemistry. 57, pp. 15489 - 15499. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2018. ISSN 0020-1669

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.8b02807>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.85**Posición de publicación:** 4**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45

- 32** A. Pereira; D. Santamaría-Pérez; J. Ruiz-Fuertes; F. J. Manjón; V. Cuenca-Gotor; R. Vilaplana; O. Gomis; C. Popescu; A. Muñoz; P. Rodríguez-Hernandez; A. Segura; L. Gracia; A. Beltran; P. Ruleova; C. Drasar; J. A. Sans Tresserras. Experimental and Theoretical Study of Bi₂O₂Se under compression. Journal of physical chemistry. C.122, pp. 8853 - 8867. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2018. ISSN 1932-7447

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b02194>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.309**Posición de publicación:** 44**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.309**Posición de publicación:** 60**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 148**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 293

Fuente de impacto: WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.309**Posición de publicación:** 34**Categoría:** NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 94

- 33** Roman A. Roca; Pablo S. Lemos; Lourdes Gracia; Juan Andrés; Elson Longo. Uncovering the Metastable γ -Ag₂WO₄ Phase: A Joint Experimental and Theoretical Study. Rsc Advances. 7, pp. 5610 - 5620. (Reino Unido): 2017. ISSN 2046-2069

DOI: <https://doi.org/10.1039/C6RA24692C>**Handle:** <http://hdl.handle.net/10550/65484>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 0**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.936**Posición de publicación:** 71**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 171

- 34** L. X. Lovisa; J. Andrés; L. Gracia; M. S. Li; C. A. Paskocimas; M. R. D. Bomio; V. D. Araujo; E. Longo; F. V. Motta. Towards an Understanding of the Photoluminescent Properties of ZrO₂: Tm³⁺, Tb³⁺, Eu³⁺. A Combined Experimental and Theoretical Study. Journal of Alloys and Compounds. 695, pp. 3094. (Suiza): 2017. ISSN 0925-8388

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.779**Posición de publicación:** 49**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.779**Posición de publicación:** 62**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.779**Posición de publicación:** 4**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 147**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 285**Categoría:** METALLURGY & METALLURGICAL ENGINEERING**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 75

- 35** Felipe A. La Porta; André E. Nogueira; Tatiana A. Mulinari; Lourdes Gracia; Juan Andrés; José A. Varela; Elson Longo. A theoretical and experimental investigation on the optical and photocatalytic properties of ZnS nanoparticles. Journal of Physics and Chemistry of Solids. 103, pp. 189. (Estados Unidos de América): 2017. ISSN 0022-3697

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.207**Posición de publicación:** 85**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.207**Posición de publicación:** 35**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 171**Categoría:** PHYSICS, CONDENSED MATTER**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 67

- 36** Santiago Maya-Johnson; Lourdes Gracia; Elson Longo; Juan Andres; Edson R. Leite. Synthesis of CeO₂ nanoclusters with cuboctahedron shape and it assemble into cuboid nanoparticles by oriented attachment. Chemnanomat. 3, pp. 232. (Alemania): 2017. ISSN 2199-692X
- Tipo de producción:** Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
- Posición de firma:** 0
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 3.173
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 66
Num. revistas en cat.: 171
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 3.173
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 78
Num. revistas en cat.: 285
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)
Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY
Índice de impacto: 3.173
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 42
Num. revistas en cat.: 92
- 37** R.C. de Oliveira; C.C. de Foggi; M. Mondego Teixeira; M.D. Penha da Silva; B.N Alves da Silva; M. Assis; M. S. Li; C.E. Vergani; A.L Machado; J. Andres; L. Gracia; E. Longo. Mechanism of antibacterial activity via morphology change of α -AgVO₃: theoretical and experimental insights. Acs Applied Materials & Interfaces. 9, pp. 11472 - 11481. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2017. ISSN 1944-8244
- Tipo de producción:** Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
- Posición de firma:** 0
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 8.097
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 26
Num. revistas en cat.: 285
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)
Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY
Índice de impacto: 8.097
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 15
Num. revistas en cat.: 92
- 38** M. C. Oliveira; L. Gracia; M. de Assis; I. L. Viana Rosa; M. F. C. Gurgel; E. Longo; J. Andres. Mechanism of Photoluminescence in Intrinsically Disordered CaZrO₃ Crystals: First Principles Modeling of the Excited Electronic States. Journal of Alloys and Compounds. 722, pp. 981 - 995. (Suiza): 2017. ISSN 0925-8388
- Tipo de producción:** Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
- Posición de firma:** 0
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Índice de impacto: 3.779
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 49
Num. revistas en cat.: 147
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 3.779
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 62
Num. revistas en cat.: 285
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)
Categoría: METALLURGY & METALLURGICAL ENGINEERING
Índice de impacto: 3.779
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 4
Num. revistas en cat.: 75

- 39** Juan Andrés; Amanda F. Gouveia; Lourdes Gracia; Elson Longo; Giovani Manzeppi Faccin; Edison Zacarias da Silva; Douglas Henrique Pereira; Miguel Angel San-Miguel. Formation of Ag nanoparticles under electron beam irradiation. Atomistic origins from first-principles calculations. International Journal of Quantum Chemistry. 25551, pp. 1 - 15. (Estados Unidos de América): 2017. ISSN 0020-7608

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 2.568

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 75

Num. revistas en cat.: 147

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: MATHEMATICS, INTERDISCIPLINARY APPLICATIONS

Índice de impacto: 2.568

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 18

Num. revistas en cat.: 103

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Índice de impacto: 2.568

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 17

Num. revistas en cat.: 37

- 40** Oliveira F.K.F.; Oliveira M. C.; Paskocimas C.A.; Motta F.V.; Bomio M.R.D.; Gracia L.; Longo E.; Andrés J. Experimental and theoretical study to explain the morphology of CaMoO₄ crystal. Journal of Physics and Chemistry of Solids. 114, pp. 141. (Estados Unidos de América): 2017. ISSN 0022-3697

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 2.207

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 85

Num. revistas en cat.: 171

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: PHYSICS, CONDENSED MATTER

Índice de impacto: 2.207

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 35

Num. revistas en cat.: 67

- 41** Armando Beltrán; Lourdes Gracia; Juan Andrés; Elson Longo. First-Principles Study on Polymorphs of AgVO₃: Assessing to Structural Stabilities and Pressure-Induced Transitions. Journal of physical chemistry. C.121, pp. 27624 - 27642. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2017. ISSN 1932-7447

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 4.484

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 38

Num. revistas en cat.: 147

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 4.484

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 54

Num. revistas en cat.: 285

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Índice de impacto: 4.484

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 33

Num. revistas en cat.: 92

- 42** J. Andrés; A. F. Gouveia; L. Gracia; E. Longo; G. M. Faccin; E. Z. da Silva; D. H. Pereira; M. A. San-Miguel. Formation of Ag nanoparticles under electron beam irradiation. Atomistic origins from first-principles calculations. International Journal of Quantum Chemistry. 25551, pp. 1 - 15. (Estados Unidos de América): 2017. ISSN 0020-7608
DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.25551>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.568
Posición de publicación: 75
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.568
Posición de publicación: 18
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.568
Posición de publicación: 17
- Tipo de soporte:** Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 147
Categoría: MATHEMATICS, INTERDISCIPLINARY APPLICATIONS
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 103
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 37
- 43** Pablo S. Lemos; Angela Altomare; Amanda F. Gouveia; Içamira C. Nogueira; Lourdes Gracia; Rosa Llusar; Juan Andrés; Elson Longo; Laécio S. Cavalcante. Synthesis and characterization of metastable β -Ag₂WO₄: An experimental and theoretical approach. Dalton Transactions. 45, pp. 1185 - 1191. (Reino Unido): 2016. ISSN 1477-9226
DOI: <https://doi.org/10.1039/c5dt03754a>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.177
Posición de publicación: 7
- Tipo de soporte:** Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 46
- 44** Mateus M. Ferrer; Amanda F. Gouveia; Lourdes Gracia; Elson Longo; Juan Andrés. A 3D platform for the morphology modulation of materials: First principles calculations on the thermodynamic stability and surface structure of metal oxides. Dalton Transactions. 24 - 025007, pp. 1 - 10. (Reino Unido): 2016. Disponible en Internet en: <<http://iopscience.iop.org/0965-0393/24/2/025007>>. ISSN 1477-9226
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.859
Posición de publicación: 7
- Tipo de soporte:** Revista
Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 46
- 45** Elson Longo; Waldir Avansi Jr; Jefferson Bettini; Juan Andrés; Lourdes Gracia. In situ Transmission Electron Microscopy observation of Ag nanocrystal evolution by surfactant free electron-driven synthesis. Scientific Reports. 6 - 21498, pp. 1 - 8. (Reino Unido): 2016. ISSN 2045-2322
DOI: <https://doi.org/10.1038/srep21498>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.228
Posición de publicación: 10
- Tipo de soporte:** Revista
Categoría: MULTIDISCIPLINARY SCIENCES
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 64

- 46** Marisa C. Oliveira; L. Gracia; I. C. Nogueira; M. F. C. Gurgel; J.M. R. Mercury; E. Longo; J. Andres. Synthesis and Morphological Transformation of BaWO₄ Crystals: Experimental and Theoretical Insights. *Ceramics International*. 42, pp. 10913 - 10921. (Reino Unido): 2016. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ceramint.2016.03.225>>. ISSN 0272-8842
- Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- Posición de firma:** 0
- Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** MATERIALS SCIENCE, CERAMICS
- Índice de impacto:** 2.758 **Revista dentro del 25%:** Si
- Posición de publicación:** 2 **Num. revistas en cat.:** 26
- 47** Fabbro, Maria; Gracia, Lourdes; Silva Souza, Gabriela; Andrés, Juan; Cordoncillo, Eloisa; Longo, Elson; Serejo dos Santos, Luís Presley. Understanding the formation and growth of Ag nanoparticles on silver chromate induced by electron irradiation in electron microscope: A combined experimental and theoretical study. *Journal of Solid State Chemistry*. 239, pp. 220 - 227. (Estados Unidos de América): 2016. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.jssc.2016.03.050>>. ISSN 0022-4596
- Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- Posición de firma:** 0
- Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
- Índice de impacto:** 2.265 **Revista dentro del 25%:** No
- Posición de publicación:** 16 **Num. revistas en cat.:** 46
- Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL
- Índice de impacto:** 2.265 **Revista dentro del 25%:** No
- Posición de publicación:** 76 **Num. revistas en cat.:** 146
- 48** San-Miguel, Miguel; da Silva, Edison; Zanetti, Sonia; Cilense, Mario; Fabbro, Maria; Gracia, Lourdes; Andrés, Juan; Longo, Elson. In Situ Growth of Ag Nanoparticles on α -Ag₂WO₄ Under Electron Irradiation Using a Transmission Electron Microscope: Probing the Physical Principles. *Nanotechnology*. 27 - 225703, pp. 1 - 9. (Reino Unido): 2016. ISSN 0957-4484
- DOI:** <https://doi.org/10.1088/0957-4484/27/22/225703>
- Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
- Posición de firma:** 0
- Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
- Índice de impacto:** 3.44 **Revista dentro del 25%:** Si
- Posición de publicación:** 60 **Num. revistas en cat.:** 275
- Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** PHYSICS, APPLIED
- Índice de impacto:** 3.44 **Revista dentro del 25%:** Si
- Posición de publicación:** 28 **Num. revistas en cat.:** 148
- Fuente de impacto:** WOS (JCR) **Categoría:** NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY
- Índice de impacto:** 3.44 **Revista dentro del 25%:** No
- Posición de publicación:** 35 **Num. revistas en cat.:** 87
- 49** Fabbro, Maria; Saliby, Carla; Gracia, Lourdes; Andrés, Juan; Cordoncillo, Eloisa; Longo, Elson; Serejo dos Santos, Luís Presley. Synthesis, antifungal evaluation and optical properties of silver molybdate microcrystals in different solvents: A combined experimental and theoretical study. *Dalton Transactions*. 45, pp. 10736 - 10743. (Reino Unido): 2016. ISSN 1477-9226
- DOI:** <https://doi.org/10.1039/c6dt00343e>
- Tipo de producción:** Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.177

Posición de publicación: 7

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 46

- 50** Regiane. C. Oliveira; M. Assis; M. Mondego; M. Penha; M. S. Li; J. Andres; L. Gracia; E. Longo. An Experimentally and Computational Study of β -AgVO₃: Optical Properties and the Formation of Ag Nanoparticles. Journal of physical chemistry. C.120, pp. 12254 - 12264. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2016. ISSN 1932-7447

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b02840>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.509

Posición de publicación: 31

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 146

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.509

Posición de publicación: 43

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 275

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.509

Posición de publicación: 25

Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 87

- 51** R.C. de Oliveira; L. Gracia; M. Assis; M. S. Li; J. Andres; E. Longo; L.S. Cavalcante. Disclosing the Electronic Structure and Optical Properties of Ag₄V₂O₇ crystals: Experimental and Theoretical Insights. Crystengcomm. 18, pp. 6483 - 6491. (Reino Unido): 2016. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/c6ce01269h>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.474

Posición de publicación: 49

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 166

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.474

Posición de publicación: 5

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 26

- 52** Wyllamanney da Silva Pereira; Mateus Meneghetti Ferrer; Gleice Botelho; Lourdes Gracia; Içamira Costa Nogueira; Ivo Mateus Pinatti; Ieda Lúcia Viana Rosa; Felipe de Almeida La Porta; Juan Andrés; Elson Longo. Effects of chemical substitution on the structural and optical properties of α -Ag₂-2xNixWO₄ ($0 \leq x \leq 0.08$) Solid Solutions. Physical Chemistry Chemical Physics. 18, pp. 21975. (Reino Unido): 2016. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/c6cp00575f>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.449

Posición de publicación: 38

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 146

Fuente de impacto: WOS (JCR)



Índice de impacto: 4.449
Posición de publicación: 6

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 36

- 53** Roman A. Roca; Amanda F. Gouveia; Pablo S. Lemos; Lourdes Gracia; Juan Andrés; Elson Longo. Formation of Ag Nanoparticles on β -Ag₂WO₄ through Electron Beam Irradiation: A Synergetic Computational and Experimental Study. Inorganic Chemistry. 55, pp. 8661 - 8671. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2016. ISSN 0020-1669

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.6b01215>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 4.82

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 4

Num. revistas en cat.: 46

- 54** Gabriela S. Silva; Lourdes Gracia; Maria T. Fabbro; Luis P. S. Santos; Hector Beltrán-Mir; Eloisa Cordoncillo; Elson Longo; Juan Andrés. Theoretical and Experimental Insight on Ag₂CrO₄ Microcrystals: Synthesis, Characterization and Photoluminescence Properties. Inorganic Chemistry. 55, pp. 8961 - 8970. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2016. ISSN 0020-1669

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.6b01452>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Índice de impacto: 4.82

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 4

Num. revistas en cat.: 46

- 55** Marisa C. Oliveira; L. Gracia; I. C. Nogueira; M. F. C. Gurgel; J.M. R. Mercury; E. Longo; J. Andres. On the morphology of BaMoO₄ crystals: A theoretical and experimental approach. Crystal Research and Technology. 227, pp. 1 - 11. (Alemania): 2016. ISSN 0232-1300

DOI: <https://doi.org/10.1002/crat.201600227>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY

Índice de impacto: 1

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 20

Num. revistas en cat.: 26

- 56** G. Botelho; J. Andres; L. Gracia; L. S. Matos; E. Longo. Photoluminescence and Photocatalytic Properties of Ag₃PO₄: An Experimental and Theoretical Investigation. Chempluschem. 81, pp. 201 - 212. (Alemania): Wiley, 2016. ISSN 2192-6506

DOI: <https://doi.org/10.1002/cplu.201500485>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 2.797

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 64

Num. revistas en cat.: 166

- 57** F.M.C. Batista; F.A. La Porta; L. Gracia; E. Cerdeiras; L. Mestres; M. Siu Li; N.C. Batista; J. Andrés; E. Longo; L.S. Cavalcante. A joint experimental and theoretical investigations on the electronic structure and photoluminescence properties of Al₂(WO₄)₃ powders. Journal of Molecular Structure. 1081, pp. 381 - 388. (Holanda): Elsevier, 2015. ISSN 0022-2860

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2014.10.016>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 1.78

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 94

Num. revistas en cat.: 144

- 58** W. da Silva Pereira; J. Andrés; L. Gracia; M. A. San-Miguel; E. Z. da Silva; E. Longo; V. M. Longo. Elucidating the real-time Ag nanoparticle growth on α -Ag₂WO₄ during electron beam irradiation: experimental evidence and theoretical insights. Physical Chemistry Chemical Physics. 17, pp. 5352 - 5359. (Reino Unido): 2015. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/c4cp05849f>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 4.449

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 32

Num. revistas en cat.: 144

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Índice de impacto: 4.449

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 6

Num. revistas en cat.: 35

- 59** J. Andrés; L. Gracia; P. González-Navarrete; V. S. Safont. Chemical structure and reactivity by means of quantum chemical topology analysis. Computational And Theoretical Chemistry. 1053, pp. 17 - 30. (Holanda): Elsevier, 2015. ISSN 2210-271X

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2014.10.010>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 1.403

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 104

Num. revistas en cat.: 144

- 60** J. Andrés; M. M. Ferrer; L. Gracia; A. Beltran; V. M. Longo; G. H. Cruvinel; R. L. Tranquilin; E. Longo. A Combined Experimental and Theoretical Study on the Formation of Ag Filaments on β -Ag₂MoO₄ Induced by Electron Irradiation. Particle & particle systems characterization. pp. 1 - 6. (Alemania): Wiley-VCH, 2015. ISSN 0934-0866

DOI: <https://doi.org/10.1002/ppsc.201400162>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 4.367

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 33

Num. revistas en cat.: 144

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 4.367

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 42

Num. revistas en cat.: 271

Fuente de impacto: WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.367**Posición de publicación:** 23**Categoría:** NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 83

- 61** G. Botelho; J. C. Sczancoski; J. Andrés; L. Gracia; E. Longo. An Experimental and Theoretical Study on the Structure, Optical Properties, and Growth of Metallic Silver Nanostructures in Ag₃PO₄. Journal of physical chemistry. C.119, pp. 6293 - 6306. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2015. ISSN 1932-7447
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp512111v>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.509
Posición de publicación: 30
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.509
Posición de publicación: 40
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.509
Posición de publicación: 22
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 144
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 271
Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 83
- 62** R. A. Roca; J. C. Sczancoski; I. C. Nogueira; M. T. Fabbro; H. C. Alves; L. Gracia; L. P. S. Santos; C. P. de Sousa; J. Andrés; G. E. Luz Jr.; E. Longo; L. S. Cavalcante. Facet-dependent photocatalytic and antibacterial properties of alpha- Ag₂WO₄ crystals: Combining experimental data and theoretical insights. Catalysis Science & Technology. 5, pp. 4091 - 4107. (Reino Unido): RSC Publishing, 2015. ISSN 2044-4753
DOI: <https://doi.org/10.1039/c5cy00331h>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.287
Posición de publicación: 28
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 144
- 63** J. Andrés; L. Gracia; M. Ferrer; A. Gouveia; E. Longo. Effects of surface stability on the morphological transformation of metals and metal oxides as investigated by first principles calculations. Nanotechnology. 26, (Reino Unido): 2015. ISSN 0957-4484
DOI: <https://doi.org/10.1088/0957-4484/26/40/405703>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.573
Posición de publicación: 51
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.573
Posición de publicación: 24
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.573
Posición de publicación: 24
Tipo de soporte: Revista
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 271
Categoría: PHYSICS, APPLIED
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 145
Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY



Índice de impacto: 3.573
Posición de publicación: 30

Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 83

- 64** M. T. Fabbro; C. Saliby; L. R. Rios; F. La Porta; L. Gracia; M. Li; J. Andres; L. P. S. Santos; E. Longo. Identifying and rationalizing the morphological, structural, and optical properties of β -Ag₂MoO₄ microcrystals, and the formation process of Ag nanoparticles on their surfaces: Combining experimental data and first-principles calculations. Science And Technology Of Advanced Materials. 16, (Reino Unido): 2015. ISSN 1468-6996

DOI: <https://doi.org/10.1088/1468-6996/16/6/065002>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 3.433

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 54

Num. revistas en cat.: 271

- 65** D. G. Stroppa; L. A. Montoro; A. Campello; L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés; E. R. Leite; A. J. Ramirez. Prediction of dopant atoms distribution on nanocrystals using thermodynamic arguments. Physical Chemistry Chemical Physics. 16, pp. 1089 - 1094. (Reino Unido): 2014. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/c3cp53427h>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 4.493

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 32

Num. revistas en cat.: 139

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Índice de impacto: 4.493

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 6

Num. revistas en cat.: 34

- 66** E. Longo; D. P. Volanti; V. M. Longo; L. Gracia; I. C. Nogueira; M. A. P. Almeida; M. M. Ferrer; J. Andrés; L. S. Cavalcante. Towards an Understanding of the Growth of Ag Filaments on α -Ag₂WO₄ and their Photoluminescent Properties: A Combined Experimental and Theoretical Study. Journal of physical chemistry. C.118, pp. 1229 - 1239. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2014. ISSN 1932-7447

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp408167v>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 4.772

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 29

Num. revistas en cat.: 139

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 4.772

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 32

Num. revistas en cat.: 260

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Índice de impacto: 4.772

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 21

Num. revistas en cat.: 80

- 67** A. Beltrán; L. Gracia; E. Longo; J. Andrés. First-principles Study of Pressure-induced Phase Transition and Electronic Property of Ag_2MoO_4 . Journal of physical chemistry. C.118, pp. 3724 - 3732. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2014. ISSN 1932-7447
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp4118024>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Revista dentro del 25%: Si
Índice de impacto: 4.772
Num. revistas en cat.: 139
Posición de publicación: 29
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 260
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY
Índice de impacto: 4.772
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 32
Num. revistas en cat.: 80
- 68** L. F. da Silva; J. C. M' Peko; A. Mesquita; E. Antonelli; M. L. Moreira; M. I. B. Bernardi; V. R. Mastelaro; A. Beltrán; L. Gracia; J. Andrés. Insight into the Effects of Fe Addition on the Local Structure and Electronic Properties of SrTiO_3 . Journal of physical chemistry. C.118, pp. 4930 - 4940. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2014. ISSN 1932-7447
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp408839q>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Revista dentro del 25%: Si
Índice de impacto: 4.772
Num. revistas en cat.: 139
Posición de publicación: 29
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 260
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY
Índice de impacto: 4.772
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 21
Num. revistas en cat.: 80
- 69** J. Andrés; L. Gracia; P. o Gonzalez-Navarrete; V. M. Longo; W. Avansi Jr; D. P. Volanti; M. M. Ferrer; P. S. Lemos; F. A. La Porta; A. C. Hernandez; E. Longo. Structural and electronic analysis of the atomic scale nucleation of Ag on $\alpha\text{-Ag}_2\text{WO}_4$ induced by electron irradiation. Scientific Reports. 4, pp. 5391. (Reino Unido): 2014. ISSN 2045-2322
DOI: <https://doi.org/10.1038/srep05391>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Categoría: MULTIDISCIPLINARY SCIENCES
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Revista dentro del 25%: Si
Índice de impacto: 5.578
Num. revistas en cat.: 57
Posición de publicación: 5

- 70** F. A. La Porta; L. Gracia; J. Andrés; J. R. Sambrano; J. A. Varela; E. Longo. A DFT Study of Structural and Electronic Properties of ZnS Polymorphs and its Pressure-Induced Phase Transitions. Journal of the American Ceramic Society. 1081, pp. 381 - 388. (Estados Unidos de América): Wiley, 2014. ISSN 0002-7820
DOI: <https://doi.org/10.1111/jace.13191>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: MATERIALS SCIENCE, CERAMICS
Índice de impacto: 2.61
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 3
Num. revistas en cat.: 26
- 71** M. L. Moreira; J. Andrés; L. Gracia; A. Beltrán; L. A. Montoro; J. A. Varela; E. Longo. Quantum Mechanical Modeling of Excited Electronic States and their Relationship with Cathodoluminescence Properties of BaZrO₃. Journal of Applied Physics. 114, (Estados Unidos de América): American Institute of Physics, 2013. ISSN 0021-8979
DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4816247>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: PHYSICS, APPLIED
Índice de impacto: 2.185
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 39
Num. revistas en cat.: 136
- 72** M.R.D. Bomio; R.L. Tranquillin; F.V. Motta; C.A. Paskocimas; M.R. Nascimento; R.M. Nascimento; L. Gracia; J. Andres; E. Longo. Towards an understanding the photocatalytic activity of PbMoO₄ powders with predominant (111), (100), (011), and (110) facets. A combined experimental and theoretical study. Journal of physical chemistry. C.117, pp. 21382 - 21395. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2013. ISSN 1932-7447
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp407416h>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Índice de impacto: 4.835
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 29
Num. revistas en cat.: 136
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 4.835
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 29
Num. revistas en cat.: 251
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY
Índice de impacto: 4.835
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 19
Num. revistas en cat.: 73
- 73** D. Errandonea; L. Gracia; R. Lacombe-Perales; A. Polian; J.C. Chervin. Compression of scheelite-type SrMoO₄ under quasi-hydrostatic conditions: Redefining the high-pressure structural sequence. Journal of Applied Physics. 114, pp. 043714. (Estados Unidos de América): American Institute of Physics, 2013. ISSN 0021-8979
DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4798374>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: PHYSICS, APPLIED
Índice de impacto: 2.185
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 39
Num. revistas en cat.: 136

- 74** A. L. J. Pereira; D. Errandonea; A. Beltrán; L. Gracia; O. Gomis; J. A. Sans; B. Garcia-Domene; A. Miquel-Veyrat; F. J. Manjón; A. Muñoz; C. Popescu. Structural study of α -Bi₂O₃ under pressure. Journal of physics. Condensed matter. 25, (Reino Unido): Institute of Physics Publishing, 2013. ISSN 0953-8984
DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/25/47/475402>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** PHYSICS, CONDENSED MATTER
Índice de impacto: 2.223 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 22 **Num. revistas en cat.:** 67
- 75** L. Gracia; A. Beltrán; D. Errandonea; J. Andrés. Characterization of the CaSO₄ Structure and its Pressure-induced phase transitions. A DFT study. Inorganic Chemistry. 51, pp. 1751 - 1759. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2012. ISSN 0020-1669
DOI: <https://doi.org/10.1021/ic202056b>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Índice de impacto: 4.593 **Revista dentro del 25%:** Si
Posición de publicación: 5 **Num. revistas en cat.:** 44
- 76** D.S.L. Pontes; L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés; F.M. Pontes; E. Longo. Towards an Understanding of Optical and Ferroelectric Properties of PZT Thin Films: A Joint Experimental and Theoretical Study. Journal of Materials Chemistry. (Reino Unido): 2012. ISSN 0959-9428
DOI: <https://doi.org/10.1039/c2jm15150b>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL
Índice de impacto: 6.108 **Revista dentro del 25%:** Si
Posición de publicación: 18 **Num. revistas en cat.:** 135
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 6.108 **Revista dentro del 25%:** Si
Posición de publicación: 20 **Num. revistas en cat.:** 241
- 77** A.L.J. Pereira; L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés; P.N. Lisboa-Filho; J.H.D. da Silva. Structural and Electronic Effects of Mn incorporation in TiO₂ films grown by sputtering. Journal of physical chemistry. C.116, pp. 8753 - 8762. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2012. ISSN 1932-7447
DOI: <https://doi.org/10.1021/jp210682d>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL
Índice de impacto: 4.814 **Revista dentro del 25%:** Si
Posición de publicación: 28 **Num. revistas en cat.:** 135
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 4.814 **Revista dentro del 25%:** Si
Posición de publicación: 27 **Num. revistas en cat.:** 241

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.814
Posición de publicación: 19

Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 69

- 78** A.L.J. Pereira; L. Gracia; D. Santamaría; R. Vilaplana; F.J. Manjón; M. Nalin; D. Errandonea; A. Beltrán. Isotropical and vibrational study of senarmontite Sb_2O_3 under high pressures. *Physical Review B*. 85, pp. 174108. (Estados Unidos de América): 2012. ISSN 1098-0121

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.174108>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: PHYSICS, CONDENSED MATTER

Índice de impacto: 3.767

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 15

Num. revistas en cat.: 68

- 79** F. R. Sensato; L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés; E. Longo. Structural and electronic properties of lithiated SnO_2 . A periodic DFT study. *Journal of physical chemistry*. C.116, pp. 16127 - 16137. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2012. ISSN 1932-7447

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp301677y>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 4.814

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 28

Num. revistas en cat.: 135

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 4.814

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 27

Num. revistas en cat.: 241

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Índice de impacto: 4.814

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 19

Num. revistas en cat.: 69

- 80** M. A. P. Almeida; C. Morilla-Santos; L. S. Cavalcante; P. N. Lisboa Filho; A. Beltrán; J. Andrés; L. Gracia; E. Longo; J. A. Varela. A Joint Experimental and Theoretical Study on the Magnetic Properties of FeWO_4 Nanostructures Synthesized by Microwave Assisted Hydrothermal Method. *Materials Characterization*. 73, pp. 124 - 129. (Estados Unidos de América): 2012. ISSN 1044-5803

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2012.08.006>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: MATERIALS SCIENCE,
CHARACTERIZATION & TESTING

Índice de impacto: 1.88

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 1

Num. revistas en cat.: 32

- 81** L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés. A Theoretical Study on the Pressure-Induced Phase Transitions in the Inverse Spinel Structure Zn_2SnO_4 . *Journal of physical chemistry*. C.115, pp. 7740 - 7746. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2011. ISSN 1932-7447

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp2006606>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.81

Posición de publicación: 26

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.81

Posición de publicación: 23

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.81

Posición de publicación: 17

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 129

Categoría: MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 230

Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 66

- 82** L. Gracia; V. M. Longo; L. Cavalcante; A. Beltrán; W. Avansi; M. S. Li; V. R. Mastelaro; J. A. Varela; E. Longo; J. Andrés. Presence of excited electronic state in CaWO_4 crystals provoked by a tetrahedral distortion: An experimental and theoretical investigation. *Journal of Applied Physics*. 110, pp. 043501. (Estados Unidos de América): American Institute of Physics, 2011. ISSN 0021-8979

DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3615948>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.17

Posición de publicación: 37

Tipo de soporte: Revista

Categoría: PHYSICS, APPLIED

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 124

- 83** V. M. Longo; L. Gracia; D. G. Stroppa; L. Cavalcante; M. Orlandi; A. J. Ramirez; E. R. Leite; J. Andrés; A. Beltrán; E. Longo; J. A. Varela. A joint experimental and theoretical study on the nanomorphology in CaWO_4 nanocrystals. *Journal of physical chemistry*. C.115, pp. 20113 - 20119. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2011. ISSN 1932-7447

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp205764s>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.81

Posición de publicación: 26

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.81

Posición de publicación: 23

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.81

Posición de publicación: 17

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 129

Categoría: MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 230

Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 66

- 84** D. Errandonea; L. Gracia; A. Beltrán; A. Vegas; Y. Meng. High Pressure-induced phase transitions in AgClO_4 . *Physical Review B*. 84, pp. 064103. (Estados Unidos de América): 2011. ISSN 1098-0121

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.064103>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Tipo de soporte: Revista

Categoría: PHYSICS, CONDENSED MATTER

Índice de impacto: 3.69
Posición de publicación: 13

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 68

- 85** D. Santamaría-Pérez; L. Gracia; G. Garbarino; A. Beltrán; R. Chuliá-Jordán; O. Gomis; D. Errandonea; Ch. Ferrer-Roca; D. Martínez-García; A. Segura. High-pressure study of the behaviour of mineral barite by X-ray diffraction. *Physical Review B*. 84 - 054102, (Estados Unidos de América): 2011. ISSN 1098-0121

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.054102>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: PHYSICS, CONDENSED MATTER

Índice de impacto: 3.69

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 13

Num. revistas en cat.: 68

- 86** P. González-Navarrete; L. Gracia; M. Calatayud; J. Andrés. Unraveling the mechanisms of the Selective Oxidation of Methanol to Formaldehyde in Vanadia Supported on Titania Catalyst. *Journal of physical chemistry. C*. 114, pp. 6039 - 6046. (Estados Unidos de América): American Chemical Society, 2010. ISSN 1932-7447

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp911528q>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 4.524

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 27

Num. revistas en cat.: 125

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 4.524

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 22

Num. revistas en cat.: 222

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Índice de impacto: 4.524

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 14

Num. revistas en cat.: 63

- 87** P. González-Navarrete; L. Gracia; M. Calatayud; J. Andrés. DFT Study of the Oxidation of Methanol to Formaldehyde on a Hydrated Vanadia Cluster. *Journal of Computational Chemistry*. 31, pp. 2493 - 2501. (Estados Unidos de América): 2010. ISSN 0192-8651

DOI: <https://doi.org/10.1002/jcc.21543>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 4.05

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 28

Num. revistas en cat.: 145

- 88** L. Gracia; J. Andrés; V. M. Longo; J. A. Varela; E. Longo. A Theoretical Study on the Photoluminescence of SrTiO₃. *Chemical Physics Letters*. 493, pp. 141 - 146. (Holanda): 2010. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2010.05.041>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 2.282

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 59

Num. revistas en cat.: 125

Fuente de impacto: WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.282**Posición de publicación:** 11**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 32

- 89** L. Gracia; J. Contreras-García; A. Beltrán; J. M. Recio. Bonding changes across the alpha-cristobalite → stishovite transition path in silica. High Pressure Research. 29, pp. 93 - 96. (Suiza): 2009. ISSN 0895-7959

DOI: <https://doi.org/10.1080/08957950802417164>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** PHYSICS, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 0.85**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 42**Num. revistas en cat.:** 71

- 90** D. Errandonea; Ravhi. S. Kumar; L. Gracia; A. Beltrán; S. N. Achary; A. K. Tyagi. Experimental and theoretical investigation of ThGeO₄ at high pressure. Physical Review B. 80, pp. 094101. (Estados Unidos de América): 2009. ISSN 1098-0121

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.094101>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** PHYSICS, CONDENSED MATTER**Índice de impacto:** 3.475**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 12**Num. revistas en cat.:** 66

- 91** L. Gracia; A. Beltrán; D. Errandonea. Characterization of the TiSiO₄ structure and its pressure-induced phase transformations: Density functional theory study. Physical Review B. 80, pp. 094105. (Estados Unidos de América): 2009. ISSN 1098-0121

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.094105>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** PHYSICS, CONDENSED MATTER**Índice de impacto:** 3.475**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 12**Num. revistas en cat.:** 66

- 92** M. Anicete-Santos; L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés. Intercalation Processes and Diffusion Paths of Lithium Ions in Spinel-type Structured Li_{1+x}Ti₂O₄: Density Functional Theory Study. Physical Review B. 77, pp. 085112. (Estados Unidos de América): 2008. ISSN 1098-0121

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.085112>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 0**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** PHYSICS, CONDENSED MATTER**Índice de impacto:** 3.322**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 10**Num. revistas en cat.:** 62

- 93** L. Gracia; V. Polo; J. R. Sambrano; J. Andrés. Theoretical Study on the Reaction Mechanism of VO₂⁺ with Propyne in Gas Phase. Journal of Physical Chemistry A. 112, pp. 1808 - 1816. (Estados Unidos de América): 2008. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp7109548>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.871

Posición de publicación: 33

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.871

Posición de publicación: 7

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 113

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 31

- 94** L. Gracia; P. González-Navarrete; M. Calatayud; J. Andrés. A DFT study of methanol dissociation on isolated vanadate groups. *Catalysis Today*. 139, pp. 214 - 220. (Holanda): 2008. ISSN 0920-5861

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2008.05.033>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.004

Posición de publicación: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.004

Posición de publicación: 31

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.004

Posición de publicación: 5

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, APPLIED

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 60

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 113

Categoría: ENGINEERING, CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 116

- 95** L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés. Characterization of the High Pressure Structures and Phase Transformations in SnO₂. A Density Functional Theory Study. *Journal of Physical Chemistry B*. 111, pp. 6479 - 6485. (Estados Unidos de América): 2007. ISSN 1520-6106

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp067443v>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.086

Posición de publicación: 19

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 110

- 96** F. Tielens; L. Gracia; V. Polo; J. Andrés. A Theoretical Study on the on AuXO-1/0/+1 (X= C, N, and O) Complexes: Effect of an External Electric Field. *Journal of Physical Chemistry A*. 111, pp. 13255 - 13263. (Estados Unidos de América): 2007. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp076089d>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.918

Posición de publicación: 28

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.918

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 110

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si



Posición de publicación: 6

Num. revistas en cat.: 32

- 97** L. Gracia; J. R. Sambrano; J. Andrés; A. Beltrán. Mechanistic Insights into the Reaction between VO₂⁺ and Propene Based in a DFT Study. *Organometallics*. 25, pp. 1643 - 1653. (Estados Unidos de América): 2006. ISSN 0276-7333

DOI: <https://doi.org/10.1021/om050971t>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.632

Posición de publicación: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.632

Posición de publicación: 9

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 44

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 56

- 98** L. Gracia; J. Andrés; A. Beltrán; J. R. Sambrano. DFT Study on the Water-Assisted Mechanism for the reaction between VO⁺ and NH₃ to yield VNH⁺ and H₂O. *Chemical Physics Letters*. 427, pp. 265 - 270. (Holanda): 2006. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2006.06.096>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.462

Posición de publicación: 34

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.462

Posición de publicación: 9

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 108

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 31

- 99** A. Beltrán; L. Gracia; J. Andrés. Density Functional Theory Study of the Brookite Surfaces and Phase Transitions between Natural Titania Polymorphs. *Journal of Physical Chemistry B*. 110, pp. 23417 - 23423. (Estados Unidos de América): 2006. ISSN 1520-6106

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp0643000>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.115

Posición de publicación: 17

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 108

- 100** L. Gracia; M. Calatayud; J. Andrés; C. Minot; M. Salmeron. Migration of the subsurface C impurity in Pd(111). *Physical Review B*. 71, pp. 033407. (Estados Unidos de América): 2005. ISSN 1098-0121

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.033407>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.185

Posición de publicación: 7

Tipo de soporte: Revista

Categoría: PHYSICS, CONDENSED MATTER

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 60

- 101** L. Gracia; J. García Cañadas; G. García-Belmonte; A. Beltrán; J. Andrés; J. Bisquert. Composition Dependence of the Energy Barrier for Lithium Diffusion in Amorphous WO₃. *Electrochemical and Solid State Letters*. 8, (Estados Unidos de América): 2005. ISSN 1099-0062

DOI: <https://doi.org/10.1149/1.2008868>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.97

Posición de publicación: 10

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.97

Posición de publicación: 32

Tipo de soporte: Revista

Categoría: ELECTROCHEMISTRY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 21

Categoría: MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 178

- 102** J. R. Sambrano; J. Andrés; L. Gracia; V. S. Safont; A. Beltrán. Study of the Water-Assisted Tautomerization between Hydrated Oxide, MO(H₂O)⁺, and Dihydroxide, M(OH)²⁺, Cations (M= V, Nb and Ta). *Chemical Physics Letters*. 384, pp. 56 - 62. (Holanda): 2004. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2003.11.093>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.438

Posición de publicación: 8

Tipo de soporte: Revista

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 34

- 103** L. Gracia; J. Andrés; J. R. Sambrano; V. S. Safont; A. Beltrán. DFT study of the reaction between VO₂⁺ and C₂H₆. *Organometallics*. 23, pp. 730 - 739. (Estados Unidos de América): 2004. ISSN 0276-7333

DOI: <https://doi.org/10.1021/om0342098>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.196

Posición de publicación: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.196

Posición de publicación: 9

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 45

Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 58

- 104** L. Gracia; M. Marqués; A. Beltrán; A. Martín Pendás; J. M. Recio. Bonding and compressibility in molecular and polymeric phases of solid CO₂. *Journal of physics. Condensed matter*. 16, (Reino Unido): Institute of Physics Publishing, 2004. ISSN 0953-8984

DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/16/14/038>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.049

Posición de publicación: 15

Tipo de soporte: Revista

Categoría: PHYSICS, CONDENSED MATTER

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 60

- 105** A. Waskowska. L. Gerward; J. Staun Olsen; M. Feliz; R. Llusar; L. Gracia; M. Marqués; J. M. Recio. High-pressure behavior of selenium based spinels and related structures - an experimental and theoretical study. Journal of physics. Condensed matter. 16, pp. 53 - 63. (Reino Unido): Institute of Physics Publishing, 2004. ISSN 0953-8984
DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/16/1/006>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: PHYSICS, CONDENSED MATTER

Índice de impacto: 2.049

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 15

Num. revistas en cat.: 60

- 106** J. R. Sambrano; L. Gracia; J. Andrés; S. Berski; A. Beltrán. A theoretical study on the gas phase reactions of the anions NbO₃⁻, NbO₅⁻ and NbO₂(OH)₂⁻ with H₂O and O₂. Journal of Physical Chemistry A. 108, pp. 10850 - 10860. (Estados Unidos de América): 2004. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp047229b>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 2.639

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 27

Num. revistas en cat.: 106

- 107** L. Gracia; J. R. Sambrano; V. S. Safont; M. Calatayud; A. Beltrán; J. Andrés. Theoretical Study on the Molecular Mechanism for the Reaction of VO₂⁺ with C₂H₄. Journal of Physical Chemistry A. 107, pp. 3107 - 3120. (Estados Unidos de América): 2003. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp0222696>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Índice de impacto: 2.792

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 25

Num. revistas en cat.: 101

- 108** L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés; R. Franco; J. M. Recio. Stability of MgAl₂O₄ under high-pressure conditions. High Pressure Research. 22, pp. 447 - 450. (Suiza): 2002. ISSN 0895-7959

DOI: <https://doi.org/10.1080/08957950212783>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: PHYSICS, MULTIDISCIPLINARY

Índice de impacto: 0.414

Revista dentro del 25%: No

Posición de publicación: 50

Num. revistas en cat.: 68

- 109** L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés; R. Franco; J. M. Recio. Quantum-mechanical simulation of MgAl₂O₄ under high-pressure. Physical Review B. 66, pp. 224114. (Estados Unidos de América): 2002. ISSN 1098-0121

DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.66.224114>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 0

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Categoría: PHYSICS, CONDENSED MATTER

Índice de impacto: 3.327

Revista dentro del 25%: Si

Posición de publicación: 5

Num. revistas en cat.: 56

- 110** Juan Andrés; Vicent S. Safont; Lourdes Gracia; Rosa Llusar; Elson Longo. Bridging Structure and Real-Space Topology: Understanding Complex Molecules and Solid State Materials. Applications of Topological Methods in Molecular Chemistry. Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics. chapter 17, pp. 427 - 454. (Brasil): Springer, 2017. Disponible en Internet en: <https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-319-53898-3_17>. ISBN 978-3-319-53898-3
Tipo de producción: Capítulo de libro **Tipo de soporte:** Libro
- 111** Marisa Carvalho de Oliveira; Thiago Marinho Duarte; Lourdes Gracia; Elson Longo; Juan Andres. Analysis for the Morphology Prediction of Materials from First Principles Calculations. Crystal Growth: Concepts, Mechanisms and Applications. Chapter 3, pp. 119 - 164. (China): Nova Publishers, Inc., 2017. Disponible en Internet en: <https://www.novapublishers.com/catalog/product_info.php?products_id=62644&osCsid=7ec353555e29703371adffaf9db90280>. ISBN 978-1-53612-226-8
Tipo de producción: Capítulo de libro **Tipo de soporte:** Libro
- 112** Juan Andrés; Lourdes Gracia; Patricio González-Navarrete; Vicent S. Safont. Quantum Chemical Topology Approach for Dissecting Chemical Structure and Reactivity. Applications of Topological Methods in Molecular Chemistry. Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics. Capítulo 10, pp. 257. (Francia): Springer, 2016. Disponible en Internet en: <<http://www.springer.com/gb/book/9783319290201>>. ISBN 978-3-319-29020-1
Tipo de producción: Capítulo de libro **Tipo de soporte:** Libro
- 113** R. A. Boto; M. Marqués; L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés; V. Riffet; V. Labet; J. Contreras-García. Chemical bonding under pressure. An Introduction to High-Pressure Science and Technology. pp. 137 - 164. (España): CRC Press/Balkema, Taylor and Francis Group, 2015. ISBN 9781498736220
Tipo de producción: Capítulo de libro **Tipo de soporte:** Libro
- 114** J. Contreras-García; L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés. Modelización del enlace químico y la reactividad química. Bloque I: Teoría y Simulaciones. Materia a Alta Presión, Fundamentos y Aplicaciones. pp. 109 - 138. (España): 2011. ISBN 978-84-8317-877-5
Tipo de producción: Capítulo de libro **Tipo de soporte:** Libro
- 115** P. Gonzalez-Navarrete; L. Gracia; M. Calatayud; J. Andrés. A DFT study of the Methanol dissociation on isolated vanadate groups. Science and supercomputing in Europe. pp. 1 - 18. (España): 2007. ISBN 978-99-86037-21-1
Tipo de producción: Capítulo de libro **Tipo de soporte:** Libro
- 116** A. F. Gouveia; M. Assis; L. S. Cavalcante; L. Gracia; E. Longo; J. Andrés. Reading at exposed surfaces: theoretical insights into photocatalytic activity of ZnWO₄. 1 - 1005, pp. 1 - 19. (Virgenes, Islas (Reino Unido)): 2018.
Tipo de producción: Otros
- 117** A. F. Gouveia; L. H. S. Lacerda; E. O. Gomes; L. Gracia; M. Assis; C. C. de Foggi; E. Longo; J. Andrés; M. A. San-Miguel. Morphology-Dependent Properties in Inorganic Semiconductors: An Experimental and Theoretical Approach. pp. 1 - 22. (Suiza): Springer, 2021. Disponible en Internet en: <<https://www.springer.com/series/16426>>. ISBN 2662-4761
Tipo de producción: Capítulo de libro en prensa

Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **Título del trabajo:** Silver Metal Oxides as Versatile Materials
Nombre del congreso: 2º Simposio de Química Computacional. Universidad Bernardo O'Higgins-CIBQA
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Santiago, Chile
Fecha de celebración: 2024
Fecha de finalización: 2024
Lourdes Gracia.
- 2** **Título del trabajo:** Chemical pressure-induced phase transition of DyxPr1-xPO4 solid solutions: A theoretical and experimental approach
Nombre del congreso: II workshop "Multifunctional Materials: From Basic Research to the Development of New Technologies". Universitat Jaume I
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: España
Fecha de celebración: 2024
Fecha de finalización: 2024
Lourdes Gracia.
- 3** **Título del trabajo:** Inorganic Metal Oxides as Versatile Materials
Nombre del congreso: Multifunctional Materials: From Basic Research to the Development of New Technologies
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Universitat Jaume I de Castelló, España
Fecha de celebración: 2023
Fecha de finalización: 2023
Lourdes Gracia.
- 4** **Título del trabajo:** In2O3 as multifunctional semiconductor
Nombre del congreso: XX B-MRS Meeting
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Foz Iguaçu-PR, Brasil
Fecha de celebración: 2022
Fecha de finalización: 2022
Samantha C. S. Lemos; Marcelo Assis; Edson Nossol; Iván Sorribes; Luís F. da Silva; Lourdes Gracia, Renata C. Lima; Juan Andrés; Elson Longo.
- 5** **Título del trabajo:** Silver ternary oxide compounds as multifunctional materials: fundamentals and progress of versatile semiconductors
Nombre del congreso: Encontro de Materiales y Ciencia (e-Mat&Sci2)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Brasil
Fecha de celebración: 2021



Fecha de finalización: 2021

Lourdes Gracia.

- 6** **Título del trabajo:** Nucleation of Ag on silver tungstate, phosphate and vanadate induced by electron irradiation. A Computational study
Nombre del congreso: XXXVII Reunión Bienal de la Sociedad Española de Química
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: San Sebastián, España
Fecha de celebración: 2019
Fecha de finalización: 2019
Lourdes Gracia; Juan Andrés; Elson Longo.
- 7** **Título del trabajo:** Experimental and theoretical study of the energetic, morphological, and photoluminescence properties of $\text{CaZrO}_3\text{:Eu}^{3+}$
Nombre del congreso: I Simpósio de Pesquisa e Inovação em Materiais Funcionais
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Brasil
Fecha de celebración: 2019
Fecha de finalización: 2019
M. C. Oliveira; R. A. P. Ribeiro; M. Assis; L. Gracia; J. Andrés; E. Longo; S. R. De Lázaro; M. R. D. Bomio.
- 8** **Título del trabajo:** $\text{CaZrO}_3\text{:Eu}^{3+}$: Energy, electronic, morphological, geometrical and photoluminescence properties: A synergy between experimental and first-principles calculations
Nombre del congreso: XVIII Brazilian MRS Meeting
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Brasil
Fecha de celebración: 2019
Fecha de finalización: 2019
Marisa Carvalho Oliveira; Renan Augusto Pontes Ribeiro; Lourdes Gracia; Sergio Ricardo de Lazaro; Juan Andrés; Elson Longo; Mauricio Roberto Delmonte Bomio.
- 9** **Título del trabajo:** Formation of Ag Nanoparticles on AgVO_3 induced by electron irradiation. A computational study
Nombre del congreso: 9th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2016
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: España
Fecha de celebración: 2016
Fecha de finalización: 2016
L. Gracia; R. C. de Oliveira; M. Assis; E. Longo; J. Andrés.
- 10** **Título del trabajo:** Structural and electronic analysis of the atomic scale nucleation of Ag on silver tungstate, molybdate and phosphate, induced by electron irradiation
Nombre del congreso: QUITEL 2015 (Químicos Teóricos de Expresión Latina)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Turín, Italia
Fecha de celebración: 2015

Fecha de finalización: 2015

L. Gracia; J. Andrés; A. F. Gouveia; E. Longo.

11 Título del trabajo: Complex modeling of chemical structure and reactivity by means of quantum chemical topology analysis

Nombre del congreso: 9th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2014

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Badajoz, España

Fecha de celebración: 2014

Fecha de finalización: 2014

L. Gracia; J. Andrés; V. S. Safont; P. Gonzalez-Navarrete; A. Beltrán; E. Longo.

12 Título del trabajo: Toward a deeper understanding on NiO unipolar resistive switching from first principle calculations

Nombre del congreso: 9th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2014

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Badajoz, España

Fecha de celebración: 2014

Fecha de finalización: 2014

J. Andrés; L. Gracia; A. Beltrán; E. Longo.

13 Título del trabajo: Study of Senarmontite Sb_2O_3 under high-pressure

Nombre del congreso: V Escuela de Altas Presiones

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Tenerife, España

Fecha de celebración: 2011

Fecha de finalización: 2011

A. L. J. Pereira; L. Gracia; D. Santamaria; R. Vilaplana; F. J. Manjón; M. Nalin; A. Beltrán.

14 Título del trabajo: Presence of excited electronic state in CaWO_4 crystals: An experimental and theoretical investigation

Nombre del congreso: WATOC 9th Triennial Congress (World Association of Theoretical and Computational Chemists)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 2011

Fecha de finalización: 2011

L. Gracia; V. M. Longo; A. Beltrán; J. Andrés.

15 Título del trabajo: Characterization of the CaSO_4 Structure and its Pressure-induced phase transitions. A DFT study

Nombre del congreso: ZCAM Workshop

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Zaragoza, España

Fecha de celebración: 2011

Fecha de finalización: 2011

L. Gracia; A. Beltrán; D. Errandonea; J. Andrés.

16 Título del trabajo: Interplay of the Theory and Experimental Investigations in Solid State Phenomena, Material Science and Nanotechnology

Nombre del congreso: Quitel (Químicos Teóricos de Expresión Latina)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Riviera Maya, México

Fecha de celebración: 2011

Fecha de finalización: 2011

J. Andrés; A. Beltrán; L. Gracia; V. M. Longo; M. Moreira; J. R. Sambrano; J. A. Varela; E. Longo.

17 Título del trabajo: Study of $\text{PbZr}_{0.5}\text{Ti}_{0.5}\text{O}_3$ under pressure

Nombre del congreso: Quitel (Químicos Teóricos de Expresión Latina)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Anglet, Francia

Fecha de celebración: 2010

Fecha de finalización: 2010

A. Beltrán; L. Gracia; J. R. Sambrano; N. H. Nicoletti.

18 Título del trabajo: Unraveling the mechanisms of the Selective Oxidation of Methanol to Formaldehyde in Vanadia Supported on Titania Catalyst

Nombre del congreso: 7th ESPA (Congress on Electronic Structure: Principles and Applications)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Oviedo, España

Fecha de celebración: 2010

Fecha de finalización: 2010

P. González-Navarrete; L. Gracia; M. Calatayud; J. Andrés.

19 Título del trabajo: Theoretical Characterization of the TiSiO_4 Possible Polymorphs and its Pressure-Induced Phase Transformations

Nombre del congreso: 47th EHPRG International Conference

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Paris, Francia

Fecha de celebración: 2009

Fecha de finalización: 2009

L. Gracia; A. Beltrán; D. Errandonea.

20 Título del trabajo: Bonding changes across the cristobalite $\rightarrow$ stishovite transition path

Nombre del congreso: 46th EHPRG International Conference

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Valencia, España

Fecha de celebración: 2008

Fecha de finalización: 2008

L. Gracia; J. Contreras-García; A. Beltrán; J. M. Recio.

- 21 Título del trabajo:** Phase Combining theoretical description with experimental in situ studies on the effect of alkali dopants on the structure and reactivity of titania-supported vanadium oxide catalyst
Nombre del congreso: Europacat-VIII
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Turku, Finlandia
Fecha de celebración: 2007
Fecha de finalización: 2007
M. Calatayud; C. Minot; E. Lozano Diz; A. E. Lewandowska; L. Gracia; J. Andrés; M. A. Bañares.
- 22 Título del trabajo:** Methanol oxidation to formaldehyde on vanadium oxide: a theoretical study
Nombre del congreso: COST Chemistry D36
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Helsinki, Finlandia
Fecha de celebración: 2007
Fecha de finalización: 2007
P. Gonzalez-Navarrete; L. Gracia; J. Andrés; M. Calatayud; C. Minot.
- 23 Título del trabajo:** VI Encontro SBPMat Quantum chemical modeling of the process of lithium diffusion into rutile SnO₂
Nombre del congreso: 6th Brazilian MSR Meeting-SBPMat
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Natal, Brasil
Fecha de celebración: 2007
Fecha de finalización: 2007
F. R. Sensato; L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés.
- 24 Título del trabajo:** Phase transitions and structural evolution of tin oxide at high-pressure. A Periodic DFT Study
Nombre del congreso: 44th EHPRG International Conference
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Praga, República Checa
Fecha de celebración: 2006
Fecha de finalización: 2006
L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés.
- 25 Título del trabajo:** Migration of C impurities in Pd (111)
Nombre del congreso: 3rd Annual University of California Symposium on Surface Science and its applications.
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Berkeley, Estados Unidos de América
Fecha de celebración: 2005
Fecha de finalización: 2005
L. Gracia; M. Calatayud; J. Andrés; C. Minot; M. Salmeron.

- 26** **Título del trabajo:** A theoretical Analysis on the Low Index Surfaces of the Natural Titania Polymorphs. A Periodic DFT Study
Nombre del congreso: ASEVA SUMMER SCHOOL-005. WS-17 Structure, Characterisation and Properties of Titanium Dioxide
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Ávila, España
Fecha de celebración: 2005
Fecha de finalización: 2005
L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés.
- 27** **Título del trabajo:** Combined experimental and theoretical study of the lithium diffusion in Li_xWO_3
Nombre del congreso: International Conference on Electrified Interfaces. ICEI 2004
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Bruselas, Bélgica
Fecha de celebración: 2004
Fecha de finalización: 2004
A. Beltrán; L. Gracia; F. Tielens; J. Andrés; G. García-Belmonte; J. García-Cañadas; J. Bisquert.
- 28** **Título del trabajo:** DFT Study of the interaction of oxygen with nanostructured gold surfaces
Nombre del congreso: International Conference on Electrified Interfaces. ICEI 2004
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Bruselas, Bélgica
Fecha de celebración: 2004
Fecha de finalización: 2004
F. Tielens; L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés; M. Van Brussel; C. Buess-Herman; T-D Chau; T. Visart de Bocarmé; N. Kruse; P. Geerlings; F. De Proft.
- 29** **Título del trabajo:** Two State Reactivity in gas phase. VO_2^+ with hidrocarbons
Nombre del congreso: ESPA2004 (Electronic Structure: Principles and Applications)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Valladolid, España
Fecha de celebración: 2004
Fecha de finalización: 2004
L. Gracia; J. Andrés; A. Beltrán; J. R. Sambrano.
- 30** **Título del trabajo:** H_2 -coordination of O_2^{2-} species to the molybdenum atom in Mimoun-type complexes. A topological analysis of the electron localization function (ELF)
Nombre del congreso: FD124 Quantum Inorganic Chemistry
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: York, Reino Unido
Fecha de celebración: 2003
Fecha de finalización: 2003
L. Gracia; J. Andrés; V. S. Safont; F. Sensato; R. Custodio; S. Berski.

- 31 Título del trabajo:** Titanato de Plomo y fenómenos ópticos en estado amorfo
Nombre del congreso: VI Reunión Nacional de Electrocerámica. V Conferencia Iberoamericana en Materiales Electrocerámicos.
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Castelló, España
Fecha de celebración: 2003
Fecha de finalización: 2003
S. R. de Lázaro; L. Gracia; P. S. Pizani; E. Longo; A. Beltrán.
- 32 Título del trabajo:** Bonding and compressibility in molecular and polymeric phases of solid CO₂
Nombre del congreso: Joint 19th AIRAPT & 41st EHPRG Internacional Conference
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Bordeaux, Francia
Fecha de celebración: 2003
Fecha de finalización: 2003
L. Gracia; M. Marqués; A. Beltrán; A. Martín Pendás; J. M. Recio.
- 33 Título del trabajo:** Theoretical and experimental study of the equations of state of CdGa₂Se₄
Nombre del congreso: Joint 19th AIRAPT & 41st EHPRG Internacional Conference
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Bordeaux, Francia
Fecha de celebración: 2003
Fecha de finalización: 2003
A. Beltrán; L. Gracia; J. Andrés; M. Feliz; M. Marqués; J. M. Recio; L. Gerward.
- 34 Título del trabajo:** Estabilitat de MgAl₂O₄ sota condicions d'alta pressió
Nombre del congreso: XVIII Reunió de la Xarxa de Química Teòrica i Computacional
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Barcelona, España
Fecha de celebración: 2002
Fecha de finalización: 2002
L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés; J. M. Recio.
- 35 Título del trabajo:** Ab initio equations of state, compressibilities, and phase diagrams of the spinel and two high-pressure polymorphs of MgAl₂O₄
Nombre del congreso: ESPA2002 (Electronic Structure: Principles and Applications)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Sevilla, España
Fecha de celebración: 2002
Fecha de finalización: 2002
L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés; R. Franco; L. Pueyo; J. M. Recio.
- 36 Título del trabajo:** Evaluation of the MgAl₂O₄ and interpretation of the crystal response to high-pressures and its effects on the unit cell elementary polyhedra
Nombre del congreso: European Summer School 'Ab initio Modeling in Solid State Chemistry'
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional



Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Turin, Italia

Fecha de celebración: 2001

Fecha de finalización: 2001

L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés; R. Franco; J. M. Recio; M. Marqués.

- 37 Título del trabajo:** Stability of the MgAl_2O_4 under high-pressure conditions
Nombre del congreso: XXXIX European High Pressure Research Group Meeting EHPRG'39
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Santander, España
Fecha de celebración: 2001
Fecha de finalización: 2001
L. Gracia; A. Beltrán; J. Andrés; R. Franco; J. M. Recio.

- 38 Título del trabajo:** Theoretical Study on the Structure, Energetics and Bonding of V_xO_y and V_xO_y ($x=2-4$, $y=2-10$) Systems
Nombre del congreso: Summer School in Molecular Mechanics and Quantum Chemistry
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Oxford, Reino Unido
Fecha de celebración: 2001
Fecha de finalización: 2001
M. Calatayud; L. Gracia; S. Martí; J. Andrés.

- 39 Título del trabajo:** Reactividade química ao longo de dois estados eletrônicos. A reação entre VO_2 e C_2H_4
Nombre del congreso: XI Simpósio Brasileiro de Química Teórica
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Caxambu, Brasil
Fecha de celebración: 2001
Fecha de finalización: 2001
J. Andrés; L. Gracia; V. S. Safont; J. R. Sambrano.

Trabajos presentados en jornadas, seminarios, talleres de trabajo y/o cursos nacionales o internacionales

- 1 Título del trabajo:** Cálculos teóricos en estado sólido. Programas CRYSTAL y VASP
Nombre del evento: Programa Doctorado en Ciencias con mención en Materiales Funcionales. Universidad Bernardo O'Higgins, Santiago
Intervención por: Ponente
Ciudad de celebración: Santiago, Chile
Fecha de celebración: 08/06/2022
Fecha de finalización: 08/06/2022
- 2 Título del trabajo:** Calculation of equations of state, thermodynamic properties and phase transitions in SnO_2
Nombre del evento: ESCUELA ESPAÑOLA DE ALTAS PRESIONES 2021
Intervención por: Ponente



Ciudad de celebración: Valencia, España

Fecha de celebración: 10/09/2021

Fecha de finalización: 10/09/2021

- 3 Título del trabajo:** Interplay of the Theory and Experimental Investigations in Solid State Phenomena, Material Science and Nanotechnology
Nombre del evento: 10th BRAZILIAN MRS MEETING 2011 - X ENCONTRO SBPMat
Intervención por: Ponente
Ciudad de celebración: Gramado, Brasil
Fecha de celebración: 26/09/2011
Fecha de finalización: 26/09/2011

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

Comités científicos, técnicos y/o asesores

- 1 Título del comité:** evaluación de proyectos presentados al Concurso Nacional de Proyectos FONDECYT (Fondo Nacional de Desarrollo Científico y Tecnológico) de Chile
Entidad de afiliación: Fondecyt (República de Chile)
Fecha de inicio-fin: 01/10/2021 - 30/10/2021
- 2 Título del comité:** evaluadora de proyectos presentados al Concurso Nacional de Proyectos FONDECYT (Fondo Nacional de Desarrollo Científico y Tecnológico) de Chile
Entidad de afiliación: Fondecyt (República de Chile)
Fecha de inicio-fin: 01/10/2020 - 31/10/2020
- 3 Título del comité:** evaluación de proyectos presentados al Concurso Nacional de Proyectos FONDECYT (Fondo Nacional de Desarrollo Científico y Tecnológico) de Chile
Entidad de afiliación: Fondecyt (República de Chile)
Fecha de inicio: 23/12/2024
- 4 Título del comité:** Participación en tribunal de Tesis
Entidad de afiliación: Universitat de València
Fecha de inicio: 15/05/2023
- 5 Título del comité:** reviewer in the scientific evaluation of ERC Starting Grant 2023
Entidad de afiliación: European Research Council
Fecha de inicio: 06/05/2023
- 6 Título del comité:** Participación en Tribunal de Tesis
Entidad de afiliación: UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE VALENCIA
Fecha de inicio: 21/12/2022
- 7 Título del comité:** evaluadora de proyectos presentados al Concurso Nacional de Proyectos FONDECYT (Fondo Nacional de Desarrollo Científico y Tecnológico) de Chile
Entidad de afiliación: Fondecyt (República de Chile)
Fecha de inicio: 22/11/2022



- 8 Título del comité:** Participación en Tribunal Tesis Doctoral
Entidad de afiliación: Universitat de València
Fecha de inicio: 11/03/2022
- 9 Título del comité:** Participación en Tribunal Tesis Doctoral
Entidad de afiliación: Université de La Sorbonne. Paris IV
Fecha de inicio: 15/09/2021
- 10 Título del comité:** Participación en Tribunal Final de Master
Entidad de afiliación: Universitat de València
Fecha de inicio: 09/07/2021
- 11 Título del comité:** Participación en Tribunal Final de Master
Entidad de afiliación: Universitat de València
Fecha de inicio: 26/06/2019

Gestión de I+D+i

Nombre de la actividad: Becas Iberoamérica Jóvenes Profesores Investigadores-Santander Universidades.
Fecha de inicio: 2015

Otros méritos

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

- 1 Entidad de realización:** Universidad Bernardo O'Higgins-CIBQA (Centro Integrativo de Biología y Química Aplicada),
Ciudad entidad realización: Chile
Fecha de inicio: 2024 **Duración:** 1 mes
Objetivos de la estancia: Invitado/a
Tareas contrastables: Estudio de óxidos metálicos como soporte de un catalizador de Ni, en la polimerización de etileno
- 2 Entidad de realización:** Departamento de Química, CDMF, Universidade Federal de Sao Carlos
Ciudad entidad realización: Brasil
Fecha de inicio: 2015
Objetivos de la estancia: Invitado/a
Tareas contrastables: Estudio de propiedades estructurales y electrónicas de óxidos ternarios de plata
- 3 Entidad de realización:** Departamento de Química, LIEC-CDMF, Universidade Federal de Sao Carlos
Ciudad entidad realización: Sao Carlos, Brasil
Fecha de inicio: 2013
Objetivos de la estancia: Posdoctoral
Tareas contrastables: Morphology and optical properties in Metal Tungstate Materials

- 4 Entidad de realización:** Dipartimento di Chimica e Chimica Industriale, Università degli Studi di Pisa
Ciudad entidad realización: Italia
Fecha de inicio: 2009
Objetivos de la estancia: Posdoctoral
Tareas contrastables: Utilización del método PCM a reactividad molecular
- 5 Entidad de realización:** Laboratoire de Chimie Théorique de l'Université Pierre et Marie Curie de Paris
Ciudad entidad realización: Paris, Francia
Fecha de inicio: 2005
Objetivos de la estancia: Doctorado/a
Tareas contrastables: Estudio teórico de adsorción de impurezas en Pd
- 6 Entidad de realización:** Laboratoire de Chimie Théorique de l'Université Pierre et Marie Curie de Paris.
Ciudad entidad realización: Paris, Francia
Fecha de inicio: 2003
Objetivos de la estancia: Doctorado/a
Tareas contrastables: Estudio teórico de la adsorción de impurezas en superficies de Pd.
- 7 Entidad de realización:** Departamento de Química Física y Analítica de la Facultad de Química de Oviedo
Ciudad entidad realización: Oviedo, España
Fecha de inicio: 2002
Objetivos de la estancia: Doctorado/a
Tareas contrastables: Estudio teórico de la evolución de CO₂ a alta presión

Sociedades científicas y asociaciones profesionales

Nombre de la sociedad: Socia de la Real Sociedad Española de Química
Fecha de inicio: 21/02/2019

Resumen de otros méritos

Descripción del mérito: Summary of scientific career (Resumen de la trayectoria científica)

Lourdes Gracia es Profesora Titular de Química-Física (Noviembre 2020) en la Universitat de València; Licenciada en Ciencias Químicas en 2000 y Doctora en Ciencias Químicas en 2005 por la Universitat Jaume I; Becaria FPI del MCyT (2001-2005); Personal Investigador de la UJI (2006-2007); Contratada PostDoctoral de GV (Ayudas para estancias de Doctores en Centros de Investigación de Excelencia de la Comunidad Valenciana) (2007-2009); Personal Investigador del MICINN, Consolider-Ingenio 2010 (2009-2012); Contratada PostDoctoral de CNPq (Consejo Nacional Brasileño de Desarrollo Científico y Tecnológico) en CDMF de Sao Carlos, Brasil (2013). Personal Investigador de la UJI (2014-2016); Profesora Ayudante Doctor en la UV (2016-2020).

Su investigación se encuentra en el campo de la química teórica y computacional, particularmente el estudio de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas así como el análisis de los mecanismos de los procesos de nucleación y crecimiento de filamentos metálicos en materiales basados en compuestos tipo perovskita (ABO₃), scheelita (ABO₄), A₂O₃, A₂BO₄ y A₃BO₄. Además, se han realizado estudios teóricos de transiciones de fase inducidas por presión, temperatura y dopaje en estos compuestos. Ha realizado una estancia de un mes en 2024 en la Universidad Bernardo O'Higgins de Chile. Ha sido profesora visitante y colaboradora del Prof. E. Longo en la Universidade Federal de Sao Carlos (LIEC-CDMF) de Brasil en 2013-2015 (Becas Iberoamérica Jóvenes Profesores Investigadores-Santander Universidades). Anteriormente, se realizaron algunas estancias en Università degli Studi di Pisa (Italia), colaborando con la Prof. B. Mennucci. (12/10/2009 - 12/11/2009) y LCT Laboratoire en la Université Pierre



et Marie Curie de París (15/09/2003-15/11/2003 y 01/03/2005 - 30/03/2005) colaborando con la prof. M. Calatayud.

Lourdes Gracia es coautora de más de cien publicaciones en revistas científicas internacionales de alto impacto, siete capítulos de libro y participa regularmente en congresos internacionales, universidades e instituciones de investigación en todo el mundo. Sus trabajos han recibido más de 5293 citas y su índice h es 46 según Google Scholar (o 4090 citas e índice h de 41 según Scopus). Ha participado en 7 Proyectos de Investigación del plan nacional I+D+i y en 6 de ámbito autonómico. Ha supervisado 3 Tesis Doctorales y tiene reconocidos 4 sexenios de actividad investigadora (2001-2024) por la ANECA.