

Curriculum vitae

Nombre: Rosa M^a Claramunt Vallespí

Fecha: 05/11/2021

Apellidos: Claramunt Vallespí
DNI: 77.250.888 Y

Fecha de nacimiento: 29/04/1948

Nombre: Rosa María
Sexo: Mujer

Situación profesional actual

Organismo: Universidad Nacional de Educación a Distancia (UNED)
Facultad, Escuela o Instituto: Facultad de Ciencias
Depto./Secc./Unidad estr.: Depto. Química Orgánica y Bio-Orgánica
Dirección postal: Senda del Rey 9 28040-Madrid

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 34-91-3987322
Correo electrónico: rclaramunt@ccia.uned.es

Especialización (Códigos UNESCO): 2306, 2307, 2390, 23109
Categoría profesional: Catedrática de Química Orgánica
Fecha de inicio: 1 de Agosto de 1986; Emérita desde 1 de octubre de 2018

Grupo de Investigación: [Sistemas Supramoleculares Bioorgánicos](#)

Índice h: 45

Researcher ID: [K-3614-2014](#)

Código Orcid: [0000-0001-6634-2677](#)

[Google Académico Citas](#)

[Reasearchgate Citas](#)

Lista de mejores investigadores en las áreas de Química en España (29/07/2021):

<https://grupodih.info/quimica.html>

Líneas de investigación

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

Reconocimiento molecular: aplicaciones a sistemas bioorgánicos y al desarrollo de fármacos

Biomoléculas en estado sólido; Química supramolecular; Química orgánica heterocíclica

Complejos de coordinación de ligandos heterocíclicos; Agentes de descontaminación

Enlace de hidrógeno e interacciones no covalentes; Ingeniería de cristales

Resonancia Magnética Nuclear en estado sólido

Estudios de género: Las mujeres en ciencia y tecnología

Formación Académica

Titulación Superior Fecha	Centro	
Licenciada en Ciencias Químicas	Universidad de Barcelona	30-09-1969
D.E.A. Chimie Organique	Universidad de Montpellier	1-07-1971

Doctorado	Centro	Fecha
Doctora en Ciencias Químicas	Universidad de Barcelona	20-11-1973
Docteur d'État	Universidad de Montpellier	10-04-1976

Actividades anteriores de carácter científico profesional

Puesto	Institución	Fechas
Profa. Ayudante Química Orgánica	Universidad de Barcelona	1969-1972
Assistante Étrangère Deleguée	Universidad de Montpellier (Francia)	1970-1971
Colaboradora Contratada Química Orgánica	Universidad de Barcelona	1972-1973
Profa. Ayudante Química Orgánica	Universidad de Barcelona	1974
Becaria FPI	Universidad de Barcelona	1972-1974
Becaria Fundación Juan March	University of East Anglia (Norwich, Inglaterra) Université de l'État à Mons (Bélgica) University of Lund (Suecia)	1974-1975
Becaria Postdoctoral	Université d'Aix-Marseille III (Francia)	1975-1979
Becaria Postdoctoral CSIC	Instituto de Química Médica, CSIC, Madrid	1980-1981
Profa. Titular de Universidad	UNED	1980-1986
Directora de Departamento	Química Orgánica y Biología de la Facultad de Ciencias de la UNED	1986-2004
Directora de Departamento	Química Orgánica y Bio-Orgánica de la Facultad de Ciencias de la UNED	2004-2015
Doctora vinculada al CSIC	Instituto de Química Médica, CSIC, Madrid	1985-Actualidad
Catedrática de Universidad	UNED	1986-2018

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

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Español	C	C	C
Inglés	C	C	C
Francés	C	C	C
Catalán	C	C	C
Alemán		R	

Participación en Proyectos de I+D financiados en Convocatorias públicas

Síntesis de adamantilheterociclos biológicamente activos.
CAICYT Proyecto N° 1395-82 (De 13-04-83 a 13-04-85).
2.813.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Aril-y heteroaril-alquil azoles y benzazoles: Síntesis, estructura y propiedades químicas y biológicas.
CAICYT Proyecto N° 326-84 (De 24-09-85 a 25-09-88).
3.800.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Síntesis de nitroazoles. Relación estructura-actividad.
Centrum Pharmaceutical International-Fundación Universidad Empresa N° 203 (1984).
811.200 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Diseño, síntesis, estructura, fotofísica y fotoestabilidad de nuevos compuestos fotoprotectores y láseres heterocíclicos orgánicos.
CICYT, Proyecto N° PB 87-94-C02 (De 26-07-88 a 26-07-91).
9.800.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Convocatoria infraestructura UNED 1991
Espectrómetro IR Philips
3.155.660 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Convocatoria infraestructura UNED 1993
Espectrómetro de Masas Shimadzu QP-5000 EI50
6.100.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Convocatoria equipamiento Comunidad de Madrid 1993
N° 00007/93
Espectrómetro de Masas Shimadzu QP-5000 EI50
5.000.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Mecanismo de fotoprotección y síntesis de fotoprotectores derivados de benzotriazoles y pirazoles.
DGICYT, Proyecto N° PB90-0226-C02 (De 30-09-91 a 30-09-94).
10.000.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Convocatoria equipamiento Comunidad de Madrid 1994
N° 0068/94
Espectrómetro RMN DRX-400
13.000.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Convocatoria infraestructura UNED 1994
Espectrómetro de RMN DRX-400
18.500.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Química heterocíclica supramolecular.
DGICYT, Proyecto N° PB 93-0197-C02 (De 8-07-94 a 8-07-97).
16.000.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Convocatoria equipamiento Comunidad de Madrid 1995
N° 0033/95
Espectrómetro de RMN DRX-400
15.000.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Convocatoria infraestructura UNED 1995
Espectrómetro de RMN DRX-400
7.000.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Acción especial de la Comunidad de Madrid
Proyecto N° AE00315/94 (1994-1995, 1 año).
2.250.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Acción especial de la Comunidad de Madrid
Proyecto N° AE00067/95 (1995-1996, 1 año)
2.200.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Convocatoria infraestructura UNED 1996
Sonda inversa con gradientes GCU y sonda QNP (^{15}N , ^{19}F , ^{13}C , ^1H) para espectrómetro de RMN DRX-400
4.800.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Ayuda infraestructura científico-técnica de la CICYT 1996, Programa Nacional QUI, IN96--0054
Sonda inversa con gradientes GCU y sonda QNP (^{15}N , ^{19}F , ^{13}C , ^1H) para espectrómetro de RMN DRX-400
20.000.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Localización and transfer of hydrogen
Proyecto de la Unión Europea CHRX-CT-940582
(Human Capital and Mobility)
13.000.000 Ptas
Investigadora Principal: H. H. Limbach

Estudio termoquímico de derivados N-sustituídos de azoles.
Proyecto dentro del convenio CSIC de España y JNICT Portugal.
Investigadora Principal: M^a Victoria Rous

Ingeniería de cristales: Utilización de puentes de hidrógeno y otras interacciones intermoleculares para el diseño de cristales y la predicción del empaquetamiento.
DGICYT, Proyecto N° PB 96-0001-C03-01 (De 1-10-1997 a 1-10-2000).
20.000.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Engineering of organic chiral supramolecular crystals
NATO Collaborative Research Grant CRG971079
716.186 Ptas
Investigadora Principal: C. López García

Diseño de sólidos orgánicos
Comunidad de Madrid 07N/0001/1999
7.410.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Convocatoria infraestructura UNED 1999
Contribución para un equipo RMN de sólidos WIDE-BORE
2.000.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Convocatoria infraestructura UNED 2000
Contribución para un equipo RMN de sólidos WIDE-BORE
3.000.000 Ptas
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Biomoléculas en estado sólido
MEC-DGI N° BQU2000-0252
32.480.000 Ptas

Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Convocatoria infraestructura UNED 2001
Contribución para un equipo RMN de sólidos WIDE-BORE
7.000.000 Ptas

Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Convocatoria infraestructura UNED 2002
Contribución para un equipo RMN de sólidos WIDE-BORE
54.000 Euros

Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Estructura y dinámica de compuestos bioactivos
MCYT N° BQU2003-00976
228.700 Euros

Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Ingeniería de cristales. Diseño de sólidos orgánicos. Biomoléculas
Fondos FEDER UNED05-33-002 (Orden ECI/1372/2004)
118.668 Euros

Responsable propuesta: R. M. Claramunt Vallespí

A new probe of fundamental weak hydrogen bonds: Solid state NMR
EPSRC N° GR/S47403/01
179.700,91 Euros

Responsable propuesta en Gran Bretaña: S. P. Brown

Responsable propuesta en España: R. M. Claramunt Vallespí

Moléculas bioorgánicas: Diseño, síntesis, estructura, dinámica y evaluación
MEC-CTQ2006-02586
21.780 Euros

Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Valoración de los créditos ECTS e implementación de nuevas estrategias de enseñanza-aprendizaje en las asignaturas: Química General, Bases Químicas del Medio Ambiente y Ecología. De 01/09/2006 a 31/08/2007.
UNED-I Convocatoria Redes de Investigación para la Innovación Docente
2.400 Euros

Nuevas estrategias de evaluación y ponderación en créditos ECTS de las asignaturas de Química General y de Química Orgánica II de la Licenciatura de Ciencias Químicas de la UNED. De: 20/11/2007 a 19/11/2008.
UNED-II Convocatoria Redes de Investigación para la Innovación Docente
2.400 Euros

Measurement of intermolecular spin-spin coupling constants across hydrogen bonds in crystals (PYHPY).
EU-NMR Infrastructure Action (026145)-Sixth Framework Programme (FP7)
2008-2011.

4.000 Euros

Investigadores Principales Rosa M^a Claramunt Vallespí (España) y Lyndon Emsley/Bénédicte Elena (Francia)

Reconocimiento molecular. Aplicaciones a sistemas bioorgánicos y al desarrollo de inhibidores NOS
MEC-CTQ2007-62113/BQU
193.600 Euros

Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Aprendizaje activo a través de la autoevaluación en los cursos virtuales, aplicado a las asignaturas de Ecología y Bases Químicas del Medio Ambiente. De 20/11/2007 a 19/11/2009.
UNED-III y IV Convocatorias Redes de Investigación para la Innovación Docente
4.800 Euros

Adaptación metodológica al EEES: evaluación continua y autoevaluación formativa virtual. De 20/11/2009 a 19/11/2010.
UNED-IV Convocatoria Redes de Investigación para la Innovación Docente
2.400 Euros

El enlace de hidrógeno y su influencia en la estructura de los cristales y los complejos anfitrión-huésped
MCINN-CTQ2010-16122
142.780 Euros
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Identificación de nuevos quimiotipos con propiedades antioxidantes: síntesis y aplicaciones en diferentes patologías
MINECO-CTQ2014-56833-R
98.010 Euros
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Compuestos heterocíclicos antienvjecimiento y anticancerígenos: síntesis, estudios fisicoquímicos y evaluación biológica
Departamento de Química Orgánica y Bio-Orgánica, Facultad de Ciencias, UNED e Instituto de Medicina Molecular Aplicada (IMMA), Facultad de Medicina, Universidad San Pablo-CEU

Red de Infraestructuras de RMN de Sólidos de la Comunidad Autónoma de Madrid: URJC, UAM, UCM, UNED y CSIC (Institutos de Ciencia y Tecnología de Polímeros y de Ciencia de los Materiales).
En fase de creación.

Publicaciones o Documentos Científico-Técnicos

-Libros-

Introducción a la Química Terapéutica. 1984, Editorial UNED, Madrid
Curso Experimental de Química Orgánica. 1989, Editorial UNED, Madrid
Catálisis en Química Orgánica. 1989, Editorial UNED, Madrid
Síntesis Orgánica, 1991, Editorial UNED, Madrid
Química Supramolecular, 1994, Editorial UNED, Madrid.
Química Orgánica Avanzada, 2001 (reimpresiones 2004, 2007), Editorial UNED, Madrid
Las Mujeres en las Ciencias Experimentales, 2ª edición, 2003, Editorial UNED, Madrid
Fármacos y Medicamentos, 2002, Editorial UNED, Madrid, reimpresión 2015.
Prácticas integradas de Química Orgánica, 2003, Cuadernos de prácticas, Editorial UNED, Madrid
Ecología I, 3ª reimpresión, 2010, Editorial UNED, Madrid
Ecología II, 2ª reimpresión, 2009, Editorial UNED, Madrid
Reciclado y Tratamiento de Residuos, 2007, Editorial UNED, Madrid
Biotecnología Aplicada al Medio Ambiente, 2008, Editorial UNED, Madrid
Principales Compuestos Químicos, 2010, Editorial UNED, Madrid
Mujeres en Ciencia y Tecnología, 2012, Editorial UNED, Madrid
Química Bioorgánica y Productos Naturales, 2013, Editorial UNED, Madrid

-Capítulos de Libros-

The chemistry of aromatic azapentalenes
Adv. Heterocycl. Chem. **22**, 183-316, (1978)
R. M. Claramunt, J. Elguero, A. Summers

The chemistry of pyrazolidinones: a review

Org. Prep. and Proc. **23**, 273-320, (1991)

R. M. Claramunt, J. Elguero

¹³CNMR of pyrazoles (review).

Magn. Res. Chem. **31**, 107-168, (1993)

M. Begtrup, G. Boyer, P. Cabildo, C. Cativiela, R. M. Claramunt, J. Elguero, J. I. I. García, C. Toiron, P. Vedso

Resonancia magnética nuclear de alta resolución en estado sólido

Cristalografía, Nuevas Tendencias, pp 287-309, CSIC, 1995, Madrid

J. Elguero, H.-H. Limbach, F. Aguilar-Parrilla, R. M. Claramunt, C. López

A review on polyazolybenzenes and related compounds: propellene-like aromatic compounds.

Targets in heterocyclic systems. Chemistry and properties. Eds. O. A. Attanasi and D. Spinelli, **1**, 1-56 (1997)

R. M. Claramunt, J. Elguero, C. Escolástico, C. Fernández-Castaño, C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz, M. D. Santa María

Substituent effects on the ¹⁵N NMR parameters of azoles (review).

Magn. Res. Chem. **35**, 35-75 (1997)

R. M. Claramunt, D. Sanz, C. López, J. A. Jiménez, M. L. Jimeno, J. Elguero, A. Fruchier

Azolides: Structural aspects.

Adv. Nitrogen Heterocycl. **4**, 295-367 (2000)

J. Elguero, C. Foces-Foces, D. Sanz, R. M. Claramunt

Tautomerism involving other than five- and six-membered rings.

Adv. Heterocycl. Chem. **77**, 1-50 (2000)

R. M. Claramunt, J. Elguero, A. R. Katritzky

Chemical structure and antibacterial activity of 4-quinolones: incidence in nature, preparation and properties.

Targets in Heterocyclic Systems. Chemistry and Properties. Eds. O. A. Attanasi and D. Spinelli, **4**, 167-203 (2000)

V. Milata, R. M. Claramunt, J. Elguero, P. Zálupsky.

Parámetros o factores descriptores de las propiedades fisicoquímicas de los compuestos orgánicos y relaciones QSAR en el diseño de fármacos

Introducción a la Química Farmacéutica pp 73-100, McGraw-Hill-Interamericana de España, 1993, Madrid. 2ª Edición, 2001

R. M. Claramunt

Métodos analíticos para la determinación de la pureza óptica

Introducción a la Química Farmacéutica, pp. 971-1006, McGraw-Hill-Interamericana de España, 1993, Madrid. 2ª Edición, 2001

R. M. Claramunt

The use of NMR spectroscopy to study tautomerism

Prog. NMR Spectrosc. **49**, 169-206 (2006)

R. M. Claramunt, C. López, M. D. Santa María, D. Sanz, J. Elguero

The structure of NH-benzazoles (1H-benzimidazoles, 1H- and 2H-indazoles, 1H- and 2H-benzotriazoles)

Khim. Geterotsikl. Soedin. **1**, 191-218 (2013)

J. Elguero, I. Alkorta, R. M. Claramunt, P. Cabildo, P. Cornago, M. Ángeles Farrán, M. Ángeles García, C. López, M. Pérez-Torralla, D. Santa María, D. Sanz

Mechano Heterocyclic Chemistry: Grinding and Ball Mills

Adv. Heterocycl. Chem. **112**, 117-143 (2014)

R. M. Claramunt, C. López, D. Sanz, J. Elguero

Active Pharmaceutical Ingredients (APIs), Chapter 12 in Applications of NMR spectroscopy in the solid-state, Editor L. Garrido. Springer, CSIC, (2019)

-Artículos en Internet-

- Relaciones lineales de energía libre y metodología de la investigación
<are.iqm.csic.es > [cursos](#) > [LFER](#)>
J. Elguero, I. Alkorta, C. Pardo, R. M. Claramunt, D. Sanz, P. Cabildo
- Aromaticidad y heteroaromaticidad (Partes 1 y 2)
<are.iqm.csic.es > [cursos](#) > [aromaticidad](#)>
J. Elguero, I. Alkorta, C. Pardo, R. M. Claramunt, P. Cornago, C. López
- Resonancia magnética nuclear de protón: aplicaciones en química orgánica (Partes 1-4)
<are.iqm.csic.es > [cursos](#) > [rnm](#)>
J. Elguero, I. Alkorta, C. Pardo, R. M. Claramunt, M. D. Santa María

-Artículos en temas de análisis y mejora de la actividad docente-

- C. Escolástico León, R. M. Claramunt Vallespí, J. Pérez-Esteban, M. Pavo López
Utilización de herramientas audiovisuales sobre tecnología IP como recurso didáctico en la asignatura Ecología
Revista Internacional de Tecnologías en la Educación, **1**, 13-21 (2014)
- C. Escolástico León, N. Jiménez Marsá, R. M. Claramunt Vallespí
Enseñar Ecología a través del cine
Revista Internacional en Ciencia y Sociedad, **2**, 89-98 (2015)
- C. Escolástico, R. M. Claramunt, J. Pérez-Esteban
Improved Learning through Interactive Video Mini-lectures in Ecology
Abstract Book and Proceedings Book of the INTE2017- International conference on New Horizons in Education; reviewed for the special issues (October 2017 and January 2018) of TOJET and TOJNED
- C. Escolástico, R. M. Claramunt
Nuevas Estrategias Docentes en Asignaturas del Grado en Ciencias Ambientales (NEDACA, GID2016-27)
100cias@uned, **12**, 121-127 (2019)

-Artículos-

1. A. Messeguer y R. M. Claramunt.
Síntesis de derivados de la norpetidina.
Quim. Ind. **17**, 82-88, (1971)
2. R. M. Claramunt, J. Elguero y R. Jacquier.
Effect des dipivalomethanates de Ni, Co, Eu, Et, Pr, sur les déplacements chimiques de quelques dérivés des pyrazoles.
Org. Magn. Res., **3**, 595-8, (1971)
3. J. L. Barascut, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Etude de la methylation de l-amino-s-triazole.
Bull. Soc. Chim. France, 1849-53, (1973) .
4. R. M. Claramunt, R. Granados y E. Pedroso.
Reaction de l'aminotetrazole avec différentes α -halogeno cetonas.
Bull. Soc. Chim. France, 1854-1857 (1973)
5. R. M. Claramunt, J. M. Fabrega y J. Elguero.
Recherches dans la serie du pyrazolo (3,2-c)-s-triazole.
J. Heterocycl. Chem., **11**, 751-4, (1974)
6. R. M. Claramunt, R. Granados, J. Elguero y R. Lazaro.
Reacción del 3-amino-s-triazol con haluros nitroaromáticos.
An. Quim., **70**, 986-990, (1974)

7. R. M. Claramunt, J. P. Fayet, M. C. Vertut, P. Mauret y J. Elguero.
Recherches dans la serie du *s*-triazolo (4,3-*b*)-*s*- triazole.
Tetrahedron, 31, 545-8, (1975)
8. R. M. Claramunt, R. Granados y M. C. Repolles.
Intentos de obtención de sistemas heterocíclicos derivados del 3a-azapentaleno por síntesis arínica.
An. Quim., 71, 206-7, (1975)
9. J. P. Fayet, M. C. Vertut, R. M. Claramunt, J. M. Fabrega y L. Knutsson.
Tautomerie du methyl-6 imidazo (1,2-*b*) pyrazole et du methyl-6-pyrazolo (3,2-*c*)-*s*-triazole.
Bull. Soc. Chim. France, 393-4 (1975)
10. A. Maquestiau, Y. Van Haverbeke, R. Flammang, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Comportement sous l'impact electronique de differents azolides.
Bull. Soc. Chim. France, 2693-5, (1975)
11. E. Alcalde y R. M. Claramunt.
Imidazo (1,2-*d*) tetrazole and tetrazolo (1,5-*a*) benzimidazole.
Tetrahedron Lett., 1523-4, (1975)
12. A. Avalos, R. M. Claramunt y R. Granados.
Estructura del 4-aminoisotiazol y sus sales.
An. Quim., 72, 922-5, (1976)
13. E. Alcalde y R. M. Claramunt.
Synthesis of pyrazolo (1,5-*d*) tetrazoles.
J. Heterocycl. Chem., 13, 379-381, (1976)
14. R. Faure, E. J. Vincent, R. M. Claramunt, J. M. Fabrega y J. Elguero
Etude theorique et experimentale de tetraazapentalenes
Tetrahedron, 32, 341-8, (1976)
15. J. P. Fayet, M. C. Vertut, P. Mauret, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Etude de la conformation des azolides par dipolemetrie.
Rev. Roum. Chim., 22, 471-4, (1977)
16. R. Faure, E. J. Vincent, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Etude de quelques derivés polyazapentaleniques en RMN de carbone-13
Org. Magn. Res., 2, 508-11, (1977)
17. R. M. Claramunt, J. Elguero, A. Fruchier y M. Nye.
Influencia de la naturaleza del azol sobre la isomeria azidoazol/azolotetrazol.
Afinidad, 34, 545-551, (1977)
18. R. M. Claramunt y J. Elguero.
Azidoazomethine-tetrazole isomerism in tetrazolo(1,5-*a*) perimidine.
Chem. Lett., 1441-2, (1977)
19. R. M. Claramunt, J. Elguero y A. Summers.
The chemistry of aromatic azapentalenes (**Revisión**).
Adv. in Heterocycl. Chem., 22, 183-316, (1978)
20. M. Begtrup, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Carbon-13 NMR study of *N*-methyl and *N*-acetyl derivatives of azoles and benzazoles.
J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2, 99-104, (1978)
21. E. Alcalde, R. M. Claramunt, J. Elguero y C. P. Saunderson Huber.
Electronic and molecular structure of the pyrazolo (1,5-*d*) tetrazole system.
J. Heterocycl. Chem., 15, 395-9 (1978)
22. A. R. Katritzky, J. B. Bapat, R. M. Claramunt, F. S. Yates, A. Dinculescu, A. T. Balaban y F. Chiraleu.
Reactions of pyrilium salts with aliphatic diamines.
J. Chem. Research (S), 395, (1978)
23. J. P. Fayet, M. C. Vertut, P. Mauret, R. M. Claramunt, J. Elguero y E. Alcalde.
Etude de la conformation et de la tautomerie des azidoazoles par dipolemetrie.

- Bull. Soc. Chim. Belges*, 87, 189-193, (1978)
24. R. N. Butler, T. McEvoy, E. Alcalde, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Cyclization of the anion of the azido-*s*-triazole into the anion of *s*-triazolo (2,3-*d*) tetrazole.
J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1, 2886-2890, (1979)
 25. R. M. Claramunt, J. Elguero, C. Marzin y J. Seita.
Proton exchange phenomena in azoles.
An. Quim. 75, 701-6, (1979)
 26. R. M. Claramunt y J. Elguero.
Proton, carbon-13, and fluorine-19 NMR study of *N*-aryl pyridinium salts.
Coll. Czechoslovak Chem. Commun., 46, 584-596, (1981)
 27. C. Guimon, S. Khayar, G. Pfister-Guillouzo, R. M. Claramunt y J. Elguero.
A photoelectron spectroscopy study of the azidopyridine-tetrazolo (1,5-*a*) pyridine.
Spectroscopy Lett., 14, 747-53, (1981)
 28. R. M. Claramunt, R. Gallo, J. Elguero, D. Mathieu y R. Phan-Tan-Luu.
Application of the modern methods of building optimum experimental matrices.
J. Chem. Phys., 78, 805-814, (1981)
 29. G. Guimon, S. Khayar, G. Pfister-Guillouzo, R. M. Claramunt y J. Elguero.
A direct photoelectron spectroscopy study of 2-azidopyridine pyrolysis.
Spectroscopy Lett., 15, 435-8, (1982)
 30. R. M. Claramunt, H. Hernández, J. Elguero y S. Julia
Synthese et reactivité de methylene-1, 1-dipyrzoles.
Bull. Soc. Chim. France 2, 5-10, (1983)
 31. E. Alcalde, R. M. Claramunt y J. Elguero
Estudio cinético de la ciclación de los aniones azido-pirazólicos en aniones de pirazolo (1,5-*d*) tetrazol.
An. Quim., 79, 248-50, (1983)
 32. R. M. Claramunt, J. Elguero y T. Meco.
Synthese et etude RMN du proton des derivés de methylene-1,1-diimidazole et benzimidazole.
J. Heterocycl. Chem., 20, 1245-9, (1983)
 33. R. Faure, J. Linares, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Etude de la protonation des pyrazolines-2 par RMN de carbone-13.
Spectros. Int.J. 2, 381-92, (1983)
 34. R. M. Claramunt, J. Elguero, R. Faure y J. Elguero.
Etude de sels de pyridinium par RMN de carbone-13 et azote-14
J. Chim. Phys., 81, 413-7, (1984)
 35. R. M. Claramunt, J. Elguero, D. Mathieu y R. Phan-Tan-Luu.
Which aniline to choose for QSAR studies.
An. Quim., 80, 30-8, (1984)
 36. R. Uson, L. A. Oro, M. Esteban, D. Carmona, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Rhodium complexes with pyridazine and pyrimidine derivatives.
Polyhedron, 3, 213-221, (1984)
 37. P. Cabildo, R. M. Claramunt y J. Elguero
Synthesis and reactivity of new 1-(1-adamantyl) pyrazoles.
J. Heterocycl. Chem., 21, 249-51, (1984)
 38. P. Cabildo, R. M. Claramunt y J. Elguero
Carbon-13 NMR chemical shifts of pyrazole derivatives.
Org. Magn. Res., 22, 603-7, (1984)
 39. A. Fruchier, V. Pellegrin, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Proton, carbon-13 and nitrogen-15 NMR spectra of (1,2-¹⁵N₂) pyrazole derivatives.
Org. Magn. Res., 22, 473-5, (1984)

40. L. Oro, M. Esteban, R. M. Claramunt, J. Elguero, C. Foces y F. H. Cano.
Rhodium (I) complexes with bispyrazolylmethane ligands.
J. Organometal. Chem., 256, 79-97, (1984)
41. M. Bruix, R. M. Claramunt, J. Elguero, J. de Mendoza y C. Pascual.
The assignment of long-range ^{13}C - ^1H coupling constants in pyrazoles.
Spectroscopy Lett., 17, 757-763, (1984)
42. P. Molina, A. Lorenzo, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Synthesis of 1,2,3-triazolo (4,3-b)-1,2,4-triazole derivatives.
Tetrahedron Lett., 25, 5427-8, (1984)
43. J. M. Fabrega y R. M. Claramunt.
Estudios en química heterocíclica: serie del pirazolo(3,2-c)-s-triazol.
Afinidad, 42, 485-6, (1985)
44. M. Alajarín, P. Molina, A. Tarraga, M. J. Vilaplana, C. Foces-Foces, F. H. Cano, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Studies of the 1,2,4-triazolo (4,3-b)-1,2,4-triazole series.
Bull. Chem. Soc. Jpn., 58, 735-44, (1985)
45. R. M. Claramunt, J. Elguero y A. Fruchier.
Reaction de l'indazole avec le chlorure de trityle.
Bull. Soc. Chim. Belges, 94, 421-4, (1985)
46. M. Alajarín, P. Molina, M. J. Pérez de Vega, C. Foces-Foces, F. H. Cano, R. M. Claramunt y J. Elguero
Research in the pyrazolo (5,1-c)-1,2,4-triazole series.
Chemica Scripta 25, 230-8, (1985)
47. B. Alarcón, M. E. González, P. Cabildo, R. M. Claramunt, D. Sanz y J. Elguero.
Synthesis and in vitro antiviral activity of some *N*-adamantylazoles and benzazoles.
Eur. J. Med. Chem-Chim. Ther., 20, 359-62, (1985)
48. J. Cañada, R. M. Claramunt, J. de Mendoza y J. Elguero.
On the possibility of chlorotropy in aromatic azoles: the case of 1,2,3-triazoles and benzotriazoles.
Heterocycles, 23, 2225-8, (1985)
49. R. M. Claramunt, J. Elguero y R. Garcerán.
Synthesis by phase transfer catalysis of *N*-benzyl-, *N*-diphenylmethyl- and trityl- azoles and benzazoles.
Heterocycles, 23, 2895-2906, (1985)
50. J. Catalán, M. Menéndez, J. Laynez, R. M. Claramunt, M. Bruix, J. de Mendoza y J. Elguero.
Basicity of aminopyrazoles in relation to tautomeric and protonation studies.
J. Heterocycl. Chem., 22, 997-1000, (1985)
51. M. Bruix, J. de Mendoza, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Carbon-13 NMR determination of the protonation site of aminopyrazoles in TFA.
Magn. Res. Chem., 23, 367-374, (1985)
52. R. M. Claramunt, P. Cabildo, D. Sanz y J. Elguero.
Carbon-13 NMR spectra of 1-(1-adamantyl) azoles and benzazoles.
Spectros. Int. J., 4, 109-114, (1985)
53. P. Cabildo, R. M. Claramunt, D. Sanz, C. Foces-Foces, F. H. Cano, J. Catalán y J. Elguero.
Structure of 1-(1-adamantyl) pyrazoles.
Tetrahedron, 45, 473-8, (1985)
54. P. Ballesteros, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Reactivity of azoles towards benzaldehyde and its dimethylacetal.
Tetrahedron, 41, 5955-63, (1985)
55. F. H. Balli, R. M. Claramunt, J. Elguero y R. Faure.
Etude par RMN du carbone-13 de sels d'azidinium.
An. Quim. Serie C, 82, 57-60, (1986)
56. R. M. Claramunt, J. Elguero, R. Faure y J. P. Galy.

- Etude par RMN du carbone-13 du site de protonation des azides heterocycliques.
An. Quim. Serie C, 82, 61-4, (1986)
57. R. M. Claramunt y J. Elguero.
Estudios RMN de carbono-13 de sales de imidazolio y bencimidazolio.
An. Quim. Serie C, 82, 162-4, (1986)
58. E. Alejandro-Durán, M. Ruiz-Rubio, R. M. Claramunt, C. López y C. Pueyo.
Mutagenicity study on pyrazole, seven pyrazole derivatives and two nitroimidazoles.
Environ. Mut., 8, 611-9, (1986)
59. P. Ballesteros, J. Elguero, R. M. Claramunt, R. Faure, M. C. Foces-Foces, F. H. Cano y A. Rosseau.
The structure of indazolinone in the solid state and in solution.
J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2, 1677-81, (1986)
60. P. Molina, M. Alajarín, J. R. Sáez, M. C. Foces-Foces, F. H. Cano, J. Elguero y R. M. Claramunt.
Iminophosphorane-mediated synthesis of 1,2,4-triazolo (5,1-c)-1,2,4-triazines.
J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1, 2037-49, (1986) .
61. P. Cabildo, R. M. Claramunt, D. Sanz, M. C. Foces-Foces, F. H. Cano, J. P. Fayet. M. C. Vertut y J. Elguero.
The molecular structure of 1-(1-adamantyl) pyrazoles.
J. Heterocycl. Chem., 23, 1045-50, (1986)
62. P. Molina, A. Lorenzo, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Preparation and reactivity of mesoionic 1,2,4-triazolo (4,3-b) -1,2,4 triazole derivatives.
Tetrahedron, 42, 2121-8, (1986)
63. B. Méster, J. Elguero, R. M. Claramunt, A. Osuna, S. Castanys, M. L. Mascaró, M. J. Vilaplana y P. Molina.
Activity against *T. Cruzi* of new analogues of nifurtimox.
Arch. Der Pharm., 320, 115-20, (1987)
64. J. Elguero, R. M. Claramunt, Y. Shindo, M. Mukai, Ch. Roussel, A. Chemlal y A. Djafri.
Chemical behaviour of Δ^2 -pyrazolines in acid media.
Chemica Scripta, 27, 283-8, (1987)
65. C. Guiheuneuf, K. Sraidi, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Acidité et basicité par liaison hydrogene de pyrazoles non substitués a l'azote.
C. R. Acad. Sci. Paris, 305, 567-9, (1987)
66. D. Sanz, A. Terán, A. Giraldez, C. Birch y R. M. Claramunt.
Estudio de las actividades antiparkinsoniana y antiviral de nuevos compuestos de síntesis.
Farmacia Clínica, 4, 711-720, (1987)
67. C. Acerete, J. Catalán, F. Fabero, M. Sánchez-Cabezudo, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Structure and basicity of 2-guanidino benzimidazoles.
Heterocycles, 26, 1581-6, (1987)
68. R. M. Claramunt, D. Sanz, J. Elguero, J. Álvarez-Builla y F. Gago.
The π -value of 1-adamantyl substituent: An HPLC study.
Il Farmaco (Ed. Sci), 42, 915-919, (1987)
69. P. Molina, M. Alajarín, M. Pérez de Vega , M. C. Foces-Foces, F. H. Cano, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Synthesis of 6,7-dihydro-5H-1,2,4-triazolo(3,4,-b)-1,3,4-thiadiazines.
J. Chem. Soc. Perkin Trans. 1, 1853-60 (1987)
70. J. Elguero, R. M. Claramunt, R. Garcerán, S. Julia, L. Ávila y J. M. del Mazo.
¹³C-NMR study of polyazolyl methanes.
Magn. Reson. Chem., 25, 260-8, (1987)
71. B. Méster, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Carbon-13 NMR study of 5-nitrofurfural derivatives.
Magn. Reson. Chem., 25, 737-9, (1987)

72. D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Studies of on adamantyl derivatives of allopurinol.
S. T. P. Pharma, 3, 552-5, (1987)
73. P. Molina, M. Alajarín, C. López, J. Elguero y R. M. Claramunt.
Ring opening reaction of the 1,3-diazetidone ring.
Tetrahedron, 43, 791-7, (1987)
74. P. Ballesteros, R. M. Claramunt y J. Elguero
Study of catalytic properties of TDA-1.
Tetrahedron, 43, 2257-64 (1987)
75. P. Ballesteros, R. M. Claramunt y J. Elguero.
An improved synthesis of 2-chloro-3-methoxy-4-nitropyridine *N*-oxide, intermediate for the preparation of orellanine.
An. Quim. Serie C, 84, 53-54, (1988)
76. R. M. Claramunt, D. Sanz y A. Fruchier.
Adamantylation of 9*H*-carbazole.
An. Quim., 84, 367-370, (1988)
77. B. Méster, R. M. Claramunt, G. Gómez Alarcón y J. Lorenzo.
Antifungal activities of *N*-(5-nitrofurfurylidene)amino heterocycles.
An. Real Acad. Nac. Farm., 54, 436-441, (1988)
78. J. A. Escario, A. M. Igea, M. Contreras, A. R. Martínez-Fernández, R. M. Claramunt y C. López.
Antiparasitic activity of nine pyrazole derivatives against *T. Vaginalis*, *E. Invadens* y *P. Berghei*.
Ann. Tropic. Med. Parasitol., 82, 257-262., (1988)
79. M. C. Foces-Foces, F. H. Cano, R. M. Claramunt, A. Fruchier y J. Elguero.
Molecular structure in the solid state and in solution of nifurtimox and two pyrazol-1-yl analogs.
Bull. Soc. Chim. Belg., 97, 1055-1065, (1988)
80. J. L. Aubagnac, F. H. Cano, R. M. Claramunt, J. Elguero, R. Faure, C. Foces-Foces y P. Raj.
The structure of salts $(C_6H_5)_4 M (C_6H_5)_4 B$ where M is P, As or Sb.
Bull. Soc. Chim. France, 905-908, (1988)
81. R. Faure, E. J. Vincent, A. Rousseau, R. M. Claramunt y J. Elguero.
High resolution ^{13}C Nuclear Magnetic Resonance spectra of solid pyrazoles. Application to annular tautomerism.
Can. J. Chem., 66, 1141-1146, (1988)
82. P. Ballesteros, R. M. Claramunt, M. C. López, J. Elguero y G. Gómez-Alarcón.
Synthesis and antifungal properties of some *N,N*-bisazolylyl methanes.
Chem. Pharm. Bull., 36, 2036-2041, (1988)
83. P. Ballesteros, R. M. Claramunt, J. Elguero y M. C. López Gallego-Preciado.
Enantiomeric resolution of 3,5-dimethyl-4,4-dibromo-1,1-bispyrazolyl phenyl methane by liquid chromatography on triacetylcellulose.
Heterocycles, 27, 351-356, (1988)
84. J. Catalán, R. M. Claramunt, J. Elguero, J. Laynez, M. Menéndez, F. Anvia, J. H. Quian, M. Taagepera y R. W. Taft.
Basicity and acidity of azoles: the annelation effect in azoles.
J. Am. Chem. Soc., 110, 4105-4111, (1988)
85. J. L. Lavandera, P. Cabildo, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Synthesis and physico-chemical studies on 1,2-bisazolylyl ethanes.
J. Heterocycl. Chem., 25, 771-782, (1988)
86. M. A. Esteruelas, L. A. Oro, M. C. Apreda, C. Foces-Foces, F. H. Cano, R. M. Claramunt, C. López, J. Elguero y M. Begtrup.
Tris (pyrazol-1-yl) methane-rhodium (I) and iridium (I) complexes.
J. Organometal. Chem., 344, 93-108, (1988)
87. E. Alejandro-Duran, R. M. Claramunt, D. Sanz, M. J. Vilaplana, P. Molina y C. Pueyo.

- Study on the mutagenicity of nifurtimox and eight derivatives with the *L*-arabinose resistance test of *Salmonella Typhimurium*.
Mut. Res., 206, 193-200, (1988)
88. P. Molina, M. Alajarín, A. Vidal, J. Elguero y R. M. Claramunt. ifurtimox
Iminophosphorane-mediated synthesis of fused 1,2,4-triazines.
Tetrahedron, 44, 2249-2259, (1988)
89. C. Foces-Foces, F. H. Cano, P. Molina, M. Alajarín, M. J. Pérez de Vega, J. Palazon, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Host guest compounds. Inclusion compounds in 7-benzoyl-6-phenyl-6,7-dihydro-1-methyl-3-methylthio-5H-1,2,4-triazolo (3,4-b) (1,3,4) thiadiazinium bromide.
Tetrahedron, 44, 5117-5130 (1988)
90. J. D. Pérez, G. I. Yranzo, M. A. Ferraris, R. M. Claramunt, C. López y J. Elguero.
FVP of bis- and tris- (pyrazol-1-yl) methane. A radical reaction .
Tetrahedron, 44, 6429-6434 (1988)
91. J. D. Pérez, G. I. Yranzo, J. Elguero, R. M. Claramunt y R. Garcerán.
FVP interconversion of 1-,2- and 3-tritylindazoles.
Bull. Soc. Chim. Belges, 98, 349-354, (1989)
92. R. M. Claramunt, P. Domiano, J. Elguero y J. L. Lavandera.
Complexes de bis (pyrazolyl-1)-1,2 ethane et de bis (imidazolyl-1)-1,2 ethane avec Co(II), Cu(II), Zn(II), Sn(II) et Hg(II).
Bull. Soc. Chim. France, 472-476, (1989)
93. P. Molina, M. Alajarín, C. López Leonardo, R. M. Claramunt, M. C. Foces-Foces, F. H. Cano, J. Catalán, J. L. G. de Paz y J. Elguero.
Experimental and theoretical study of the R₃P-X bond case of betaines derived from *N*-imino phosphoranes and alkylisocyanates.
J. Am. Chem. Soc., 111, 355-363, (1989)
94. F. Tomas, J. L. M. Abboud, J. Laynez, R. Notario, L. Santos, S. O. Nilson, J. Catalán, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Tautomerism and aromaticity in 1,2,3-triazoles: The case of benzotriazole.
J. Am. Chem. Soc., 111, 7348-7353, (1989)
95. P. Molina, M. Alajarín, C. López Leonardo, C. Foces-Foces, F. H. Cano, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Reactivity of 1,3-diaryl-2,4-bis (heteroaryl-imino)-1,3-diazetidines. Formation of N¹, N², N³, N⁴, N⁵-pentasubstituted biguanides.
J. Org. Chem., 54, 1264-1268, (1989)
96. M. A. Esteruelas, L. A. Oro, R. M. Claramunt, C. López, J. L. Lavandera y J. Elguero.
Alcohol activation by Ir(COD)(tris(pyrazol-1-yl)methane) and Ir(COD)(tris(pyrazol-1-yl)ethane) cations.
J. Organometal. Chem., 366, 245-255, (1989)
97. P. Jiménez, J. Laynez, R. M. Claramunt, D. Sanz, J. P. Fayet, M. C. Vertut, J. Catalán, J. L. G. de Paz, G. Pfister-Guillouzo, C. Guimon, R. Flammang, A. Maquestiau y J. Elguero.
The problem of the tautomerism of 4(5)-nitroimidazole: and theoretical and experimental study.
New. J. Chem., 13, 151-156, (1989)
98. R. M. Claramunt, J. Elguero, M. J. Fabre, C. Foces-Foces, F. H. Cano, I. Hernández-Fuentes, C. Jaime y C. López.
A conformational study of bis- tris- and tetrakis-pyrazolylmethanes: Crystallography, L. S. R., dipole moments and theoretical calculations.
Tetrahedron, 45, 7805-7816, (1989)
99. V. López, J. Catalán, R. M. Claramunt, C. López, E. Cayon y J. Elguero.
On the relationship between thermodynamic pK_a's azoles and the oxidation potentials of their pentacyanoferrate (II) complexes.
Can. J. Chem., 68, 958-9, (1990)
100. C. López, R. M. Claramunt, D. Sanz, C. Foces-Foces, F. H. Cano, R. Faure, E. Cayon y J. Elguero.

- Structure of bis-, tris- and tetrakispyrazolylborates in the solid state and in solution.
Inorg. Chim. Acta, 176, 195-204, (1990)
101. J. Catalán, F. Fabero, M. S. Guijarro, R. M. Claramunt, M. D. Santa María, M. C. Foces, F. H. Cano, J. Elguero y R. Sastre.
Photoinduced IPT as the mechanism of ultraviolet stabilizers.
J. Am. Chem. Soc., 112, 747-749, (1990)
102. J. Catalán, J. L. G. de Paz, M. Yañez, R. M. Claramunt, C. López, J. Elguero, F. Anvia, J. H. M. Quian, M. Taagepera y R. W. Taft.
A theoretical and experimental study of the intrinsic basicities of methyldiazoles.
J. Am. Chem. Soc., 112, 1303-1312, (1990)
103. D. Sanz, R. M. Claramunt, J. Elguero, L. Salazar y M. Espada.
Rearrangement of 1-amino- and 1-alkylamino-pyrazoles to 5-aminopyrazoles.
J. Chem. Soc. Perkin Trans 1, 809-810, (1990)
104. M. C. Foces-Foces, F. H. Cano, R. M. Claramunt, D. Sanz, J. Catalán, F. Fabero, A. Fruchier y J. Elguero.
The structure of *N*-aminoazoles: an experimental (X-ray and ¹⁵N Nuclear Magnetic Resonance) and theoretical study.
J. Chem. Soc. Perkin Trans 2, 237-244, (1990)
105. P. Ballesteros, R. M. Claramunt, T. Cañada, C. Foces-Foces, F. H. Cano, J. Elguero y A. Fruchier.
A ¹H and ¹³C Nuclear Magnetic Resonance and X-ray diffraction study of the tautomerism of 2-hydroxy- and 2,3-dihydroxy-pyridine *N*-oxides.
J. Chem. Soc. Perkin Trans 2, 1215-1219, (1990)
106. R. M. Claramunt, M. C. Foces-Foces, F. H. Cano, A. Fruchier, P. Molina, M. Alajarín, C. López Leonardo y J. Elguero.
Molecular structure in the solid state and in solution of 1,3-diazetidines and pentasubstituted biguanides.
J. Chem. Soc. Perkin Trans 2, 1859-1869 (1990)
107. R. Sastre, F. Catalina, J. L. Mateo, R. M. Claramunt, M. D. Santa María y J. Catalán.
Mechanism of photostabilization of polystyrene film by dihydroxyphenyl-pyrazoles.
J. Polym. Sci. Part A, 28, 3661-8, (1990)
108. J. L. Aubagnac, R. M. Claramunt y D. Sanz.
Reduction phenomenon in the FAB mass spectra of *N*-aminoazoles with a glycerol matrix.
Org. Mass. Spectrom. Letters, 25, 293-295, (1990)
109. C. Foces-Foces, F. H. Cano, M. Martínez-Ripoll, R. Faure, Ch. Roussel, R. M. Claramunt, C. López, D. Sanz y J. Elguero.
Complete energy profile of a chiral propeller compound.
Tetrahedron: Asymmetry, 1, 65-86, (1990)
110. C. Foces-Foces, F. H. Cano, P. Cabildo, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Structure and conformation of a hetero substituted cyclooctane.
Acta Cryst., C47, 2583-2585, (1991)
111. J. L. Aubagnac, R. M. Claramunt, J. L. Lavandera y J. Elguero.
Spectres de masse FAB en mode positif de cations heterocycliques doublement charges apparentes au dibenzo [a,e] cyclooctane.
Bull. Soc. Chim. Belg., 100, 459-466, (1991)
112. J. D. Pérez, G. I. Yranzo, M. A. Ferraris, J. Elguero, R. M. Claramunt, D. Sanz y P. Cabildo.
Flash Vacuum Pyrolysis (FVP) of adamantylazoles. Part I: Indazoles.
Bull. Soc. Chim. Fr., 128, 592-595, (1991)
113. B. Méster, R. M. Claramunt, J. Elguero, J. Atienza, A. Gómez Barrio y J. A. Escario.
Research for new antichagasic drugs.
Chem. Pharm. Bull., 39, 1990-1993, (1991)

114. J. L. H. Abboud, R. Notario, M. Berthelot, R. M. Claramunt, P. Cabildo, J. Elguero, M. J. el Ghomari, W. Bouab, R. Mokhilsse y G. Guihenneuf.
"Gas-phase-like" behavior in solution chemistry.
J. Am. Chem. Soc., 113, 7489-7493, (1991)
115. A. L. Llamas-Saiz, C. Foces-Foces, P. Molina, M. Alajarín, A. Vidal, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Iminophosphorane-substituted proton sponges. Part I. X ray molecular structures of 1,8-diamino-naphthalene and 1-amino-8-triphenyl-phosphoranylideneaminonaphthalene.
J. Chem. Soc. Perkin Trans 2, 1025-1031, (1991)
116. L. Z. Chen, R. Flammang, A. Maquestiau, R. W. Taft, J. Catalán. P. Cabildo, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Thermodynamic basicity vs kinetic basicity of diazoles.
J. Org. Chem., 56, 179-183, (1991)
117. C. Jaime, A. Virgili, R. M. Claramunt, C. López y J. Elguero.
Conformational study of (*R*)-(-)-2,2,2-trifluoro-1-(9-anthryl)ethanol (Pirkle's alcohol) by dynamic NMR.
J. Org. Chem., 56, 6521-6523, (1991)
118. R. M. Claramunt, C. López, D. Sanz, J. Elguero, D. Carmona, M. Esteban, L. A. Oro y M. Begtrup.
Rhodium(I) complexes with the polydentate ligand 3,5-bis (4-methylpyrazol-1-yl)-4-methylpyrazole.
J. Organometal. Chem., 412, 259-271, (1991)
119. R. M. Claramunt y J. Elguero.
The chemistry of pyrazolidinones. A **Review**.
Org. Prep. and Proc., 23, 273-320, (1991)
120. J. L. Aubagnac, R. M. Claramunt, C. López y J. Elguero.
Negative-ion fast-atom bombardment mass spectra of pyrazolylborates with various matrices.
Rapid Commun. Mass Sp., 5, 113-116 (1991)
121. M. L. Nieto, R. M. Claramunt, M. A. Basombrio y A. O. M. Stoppani.
Essential role of the tetrahydrotriazine group of nifurtimox for activity on *Trypanosoma Cruzi* in mice.
Revista Argentina de Microbiología, 23, 200-203, (1991)
122. C. Acerete, M. L. Bañón, P. Cabildo, R. M. Claramunt, J. Elguero y J. L. Lavandera.
Basicity-structure relationships in bisazolyl-methanes and -ethanes.
Rev. Roum. Chimie, 36, 629-633, (1991)
123. J. L. M. Abboud, G. Boyer, J. Elguero, P. Cabildo y R. M. Claramunt.
Solvent effects on the ¹³C NMR parameters (¹³C chemical shifts and ¹H-¹³C coupling constants) of 1-methylpyrazole and 1-methylimidazole.
Spectrochimica Acta, 47A, 785-790, (1991)
124. J. Torres, J. L. Lavandera, P. Cabildo, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Quaternary salts of 1,2-bisazolyl- and 1,2-bisbenzazolyl-ethanes.
Bull. Soc. Chim. Belg., 101, 29-36, (1992)
125. A. Fruchier, R. M. Claramunt, J. Elguero, D. Carmona y M. Esteban.
Synthesis and analysis of the ¹H and ¹⁹F spectra of tetrafluorobenzobarrelene and its 1,3,10-trimethyl derivative.
Bull. Soc. Chim. Belg. 101, 697-699, (1992)
126. P. K. Byers, A. J. Canty, R. T. Honeyman, R. M. Claramunt, C. López, J. L. Lavandera y J. Elguero.
Synthesis and carbon-13 NMR spectroscopy of poly(pyrazol-1-yl) alkane ligands.
Gazz. Chim. Ital., 122, 341-344, (1992)
127. J. Catalán, P. Pérez, F. Fabero, J. F. K. Wilshire, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Photophysical properties of some 2-(2-hydroxyaryl) benzotriazoles: dramatic effect of an ortho-located bulky *tert*-butyl group.
J. Am. Chem. Soc., 114, 964-966, (1992)
128. J. Catalán, F. Fabero, R. M. Claramunt, M. D. Santa María, J. Elguero y R. Sastre.
New ultraviolet stabilizers: 3- and 5-(2'-hydroxyphenyl) pyrazoles.
J. Am. Chem. Soc., 114, 5039-5048, (1992)

129. P. Molina, M. Alajarín, C. López-Leonardo, F. Hernández Cano, A. L. Llamas-Saiz, C. Foces-Foces, R. M. Claramunt y J. Elguero.
2,4-Bis-imino-1,3-diazetidines: Iminophosphoranes, carbodiimides and related betaines.
J. Chem Soc. Perkin Trans. 1, 199-210, (1992)
130. P. Domiano, P. Cozzini, R. M. Claramunt, J. L. Lavandera, D. Sanz y J. Elguero.
The molecular structure of 6,8,6 and related systems.
J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2, 1609-1620, (1992)
131. S. B. Bulgarevich, M. D. Grunfest, D. Y. Movshovich, V. Bobosik, R. M. Claramunt, C. López y J. Elguero.
Conformational study of bis (2-substituted-benzimidazol-1-yl) methanes by Kerr effect and dipole moment methods.
J. Mol. Struct., 274, 197-214, (1992)
132. L. Salazar, M. Espada. C. Avendaño, R. M. Claramunt, D. Sanz y J. Elguero.
Rearrangement of *N*-(alkylamino) azoles in acid media: A new entry to *C*-amino-*N*-substituted azoles.
J. Org. Chem., 57, 1563-1567, (1992)
133. P. Ballesteros, R. M. Claramunt, C. Escolástico, M. D. Santa María y J. Elguero.
Reaction of pyrazole addition to quinones.
J. Org. Chem., 57, 1873-1876, (1992)
134. J. L. M. Abboud, P. Cabildo, T. Cañada, J. Catalán. R. M. Claramunt, J. L. G. de Paz, J. Elguero, H. Homan, R. Notario, C. Toiron y G. I. Yranzo.
Basicity of *C*-substituted pyrazoles in the gas phase: An experimental (ICR) and theoretical study.
J. Org. Chem., 57, 3938-3946, (1992)
135. M. C. López, R. M. Claramunt y P. Ballesteros.
Synthesis of bis (indazolyl) alkanes from 1-hydroxyalkylindazoles.
J. Org. Chem., 57, 5240-5243, (1992)
136. M. L. Jimeno, J. Elguero, R. M. Claramunt, P. Domiano, J. L. Lavandera y P. Cozzini.
Conformational analysis of 1,2:5,6:9,10-tribenzododeca-1,5,9-triene by ¹H NMR at 173 K.
J. Org. Chem., 57, 6682-6684, (1992)
137. P. Molina, A. Arques, R. Obon, A. L. Llamas-Saiz, C. Foces-Foces, R. M. Claramunt, C. López y J. Elguero.
Host-Guest chemistry. Methanol, ethanol and propan-1-ol inclusion compounds of 2-[*o*-(triphenylphosphoranylydenamino) benzyliden] amino-1*H*-2,3-dihydroindazol-3-one. X-ray structural characterization of the free host and its ethanol inclusion compound.
J. Phys. Org. Chem., 5, 507-517, (1992)
138. M. Begtrup, P. Vedso, P. Cabildo, R. M. Claramunt, J. Elguero y W. Meutermaans.
¹³C Chemical shifts and ¹H-¹³C coupling constants of *N*-phenyl, *N*-*p*-fluorophenyl and *N*-*o*-nitrophenyl pyrazoles.
Magn. Res. Chem., 30, 455-459, (1992)
139. J. Elguero, R. M. Claramunt, C. López y D. Sanz.
Correlación de propiedades RMN de pirazoles *N*-sustituídos con parámetros electrónicos del sustituyente.
Afinidad, 383-388, (1993)
140. C. T. Supuran, A. T. Balaban, P. Cabildo, R. M. Claramunt, J. L. Lavandera y J. Elguero.
Carbonic anhydrase activators. VII. Isozyme II activation by bisazolyl-methanes,-ethanes and related azoles.
Biol. Pharm. Bull., 16, 1236-1239 (1993)
141. P. Cabildo, R. M. Claramunt, J. Elguero, C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz y F. H. Cano.
Studies in the azole series. CII . Adamantyl and halogeno pyrazolin-5-ones.
Bull. Soc. Chim. Belg., 102, 735-747 (1993)
142. C. López, R. M. Claramunt, S. Trofimenko y J. Elguero.
A ¹³C NMR spectroscopy study of the structure of *N*-H pyrazoles and indazoles.
Can. J. Chem., 71, 678-684, (1993)

143. M. Perrin, A. Thozet, P. Cabildo, R. M. Claramunt, E. Valenti y J. Elguero.
Molecular structure and tautomerism of 3,5-bis (4-methylpyrazol-1-yl)-4-methylpyrazole.
Can. J. Chem., **71**, 1443-1449, (1993)
144. V. Bobosik, C. López, R. M. Claramunt, C. Roussel, J. L. Stein, D. Thiery y J. Elguero.
Synthesis and resolution of bis- and tris-(benzimidazol-1-yl) methanes.
Heterocycles, **35**, 1067-1074, (1993)
145. L. Salazar. M. Espada, D. Sanz, R. M. Claramunt, J. Elguero, S. García-Granda, M. R. Díaz y F. Gómez-Beltrán.
The structure of *N*-(azol-*N*-yl)formamides: A crystallographic and dynamic NMR spectroscopy study.
J. Chem. Soc. Perkin Trans 2, 377-383, (1993)
146. G. Boyer, R. M. Claramunt, J. Elguero, M. Fathalla, C. Foces-Foces, C. Jaime y A. L. Llamas-Saiz.
Synthesis and structure of new hosts related to 9,9'-bianthrhl.
J. Chem. Soc. Perkin Trans 2, 757-766, (1993)
147. A. C. Olivieri, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Proton transfer in rubazoic acid derivatives in solution and in the solid state. An NMR study.
J. Chem. Soc. Perkin Trans 2, 1597-1601, (1993)
148. R. M. Claramunt, D. Sanz, J. Catalán, F. Fabero, N. A. García, C. Foces-Foces, A. Llamas-Saiz y J. Elguero.
N-Aminoazoles. Part 2. Basicity and protonation site of *N*-aminoazoles: An experimental (pK, ¹³C and ¹⁵N NMR spectroscopy and crystallography) and theoretical study.
J. Chem. Soc. Perkin Trans 2, 1687-1699, (1993)
149. F. Toda, K. Tanaka, C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz, H. H. Limbach, F. Aguilar-Parrilla, R. M. Claramunt, C. López y J. Elguero.
Intermolecular proton transfer in host-guest crystals: The case of pyrazole included in 1,1-di (2,4-dimethylphenyl) but-2-yn-1-ol, an X-ray and solid-state ¹³C/¹⁵N NMR study.
J. Chem. Soc. Chem. Commun., 1139-1142, (1993)
150. C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz, R. M. Claramunt, D. Sanz, J. Dotor y J. Elguero.
Crystal structures of 2-(2-methoxyphenyl) perimidine and its hemihydrate.
J. Cryst. and Spec. Res., **23**, 306-312, (1993)
151. C. Foces-Foces, A. L. Llamas Saiz, R. M. Claramunt, C. López, J. Elguero, P. Molina, A. Arques y R. Obon.
Host-guest chemistry. 2. Amine inclusion compounds of 2-([*o*-triphenylphosphoranylideneamino)benzylidene]amino-1*H*-2,3-dihydroindazol-3-one. X-ray structure of its 1:1:1 inclusion complex with isopropylamine and water.
J. Incl. Phen. and Mol. Rec. in Chem., **16**, 155-168, (1993)
152. M. C. López Gallego-Preciado, P. Ballesteros, R. M. Claramunt, M. Cano, J. V. Heras, E. Pinilla y A. Monge.
The crystal and molecular structure of bis(indazolyl)pyridin-2-ylmethane (BIPM) and [Rh(BIPM)(NBD)] PF₆.
J. Organometal Chem., **450**, 237-244, (1993)
153. M. Begtrup, G. Boyer, P. Cabildo, C. Cativiela, R. M. Claramunt, J. Elguero, J. I. I. García, C. Toiron y P. Vedso.
¹³CNMR of pyrazoles (**review**).
Magn. Res. Chem., **31**, 107-168, (1993)
154. R. M. Claramunt, D. Sanz, G. Boyer, J. Catalán, J. L. G. de Paz y J. Elguero.
Experimental (¹³C and ¹⁵N NMR spectroscopy) and theoretical study of the protonation of *N*-methylazoles and *N*-methyl benzazoles.
Magn. Res. Chem., **31**, 791-800, (1993)
155. V. López, M. M. Gómez, R. M. Claramunt y B. Méster.
Cyclic voltammetry of the 4-NH₂-1,2,4-triazole-, 1-NH₂-1,2,4-triazole- and benzotriazole-pentacyano-ferrate(II) complexes at different pH values.
Portugaliae Electrochimica Acta, **11**, 211-223, (1993)

156. I. Forfar, P. Cabildo, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Synthesis of 3-(1-adamantyl)pyrazole and 3,5-di(1-adamantyl)pyrazole in a microwave oven.
Chem. Lett., 2079-2080, (1994)
157. R. M. Claramunt, J. Dotor, D. Sanz, C. Foces, A. L. Llamas-Saiz, J. Elguero, R. Flammang, J. P. Morizur, E. Chapon y J. Tortajada.
The structure of 1-*H*-perimidin-2(3-*H*)-one and its derivatives in the solid state (X-ray crystallography and CP/MAS ¹³C-NMR, in solution (¹³C-NMR) and in the gas phase (mass spectrometry).
Helv. Chim. Acta, 77, 121-139, (1994)
158. M. C. López, R. M. Claramunt y P. Ballesteros.
Synthesis of new bis(indazol-1-yl)phenylmethanes
Heterocycles, 37, 891-896, (1.994)
159. P. Cabildo, R. M. Claramunt, I. Forfar, C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz y J. Elguero.
Adamantylation of *N*-unsubstituted pyrazole derivatives: Mechanistic and structural studies.
Heterocycles, 37, 1623-1636, (1994)
160. J. L. M. Abboud, R. Notario, E. Ballesteros, M. Herreros, O. M6, M. Yañez, J. Elguero, G. Boyer y R. M. Claramunt.
Dissociative attachment of protons to 1-fluoro-and 1-chloroadamantane in the gas phase.
J. Am. Chem. Soc., 116, 2486-2492, (1994)
161. C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz, R. M. Claramunt, C. López y J. Elguero.
Structure of 3(5)-methyl-4-nitropyrazole in the solid state: Tautomerism, crystallography and the problem of desmotropy.
J. Chem. Soc., Chem. Commun., 1143-1145, (1994)
162. A. L. Llamas-Saiz, C. Foces-Foces, J. Elguero, F. Aguilar-Parrilla, H. H. Limbach, P. Molina, M. Alajarín, A. Vidal, R. M. Claramunt y C. López.
Iminophosphoranes-substituted proton sponges. Part 5. Structures in the solid state. Correlation between solid state ³¹P MAS NMR spectra and crystal structures.
J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2, 209-212, (1994)
163. A. F. Pozharski, V. V. Kuzmenko, C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz, R. M. Claramunt, D. Sanz y J. Elguero.
N-Aminoazoles. Part 3. Molecular structure and multinuclear NMR study of 1,3-diamino-benzimidazolium clorhydrate and 1-amino-3-methylbenzimidazolium iodide.
J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2, 841-846, (1994)
164. J. Elguero, F. H. Cano, C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz, H. H. Limbach, F. Aguilar-Parrilla, R. M. Claramunt y C. López.
Proton transfer in solid heterocycles: An X-ray and CPMAS NMR study.
J. Heterocycl. Chem., 31, 695-700 (1994)
165. P. Cornago, C. Escolástico, M. D. Santa María, R. M. Claramunt, D. Carmona, M. Esteban, L. A. Oro, C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz y J. Elguero.
Complexes of rhodium and iridium derived from 2,5-bis (pyrazol-1'-yl)-1,4-dihydroxybenzene.
J. Organometal. Chem., 467, 293-301 (1994)
166. A. C. Olivieri, J. Elguero, I. Sobrados, P. Cabildo y R. M. Claramunt.
Variable-field study of ¹³C-^{35,37}Cl residual dipolar in the ¹³C-CP MAS NMR spectra of pyrazole derivatives.
J. Phys. Chem., 98, 5207-5211, (1994)
167. F. Aguilar-Parrilla, R. M. Claramunt, C. López, D. Sanz, H-H. Limbach y J. Elguero.
High-resolution solid-state ¹³C and ¹⁵N NMR spectroscopy of pyrazole and 3,5-dimethylpyrazole adsorbed on alúmina and silica.
J. Phys. Chem., 98, 8752-8760 (1994)
168. J. Catalán, J. C. del Valle, R. M. Claramunt, G. Boyer, J. Laynez, J. Gómez, P. Jimenez, F. Tomas y J. Elguero.
Acidity and basicity of indazole and its *N*-methyl derivatives in the ground and in the excited state.
J. Phys. Chem., 98, 10606-10612 (1994)

169. R. Notario, M. Herreros, A. el Hammadi, J. L. M. Abboud, I. Forfar, R. M. Claramunt y J. Elguero. Similarity in physical organic chemistry: Substituent effects on the intrinsic basicity of 4-substituted pyrazoles. *J. Phys. Org. Chem.*, **7**, 657-662 (1994)
170. P. Ballesteros, C. López, C. López, R. M. Claramunt, J. A. Jiménez, M. Cano, J. V. Heras y E. Pinilla. (2,5-Norbornadiene)rhodium(I) complexes with bis- and tris-(azol-1-yl)methanes. *Organometallics*, **13**, 289-297, (1994)
171. R. M. Claramunt, C. Escolástico, D. Sanz, J-L. Aubagnac y I. Gilles. Dehalogenation reactions in frit fast-atom bombardment mass spectrometry of substituted hydroquinones. *Rapid Commun. Mass Sp.*, **8**, 471-474, (1994)
172. C. López, R. M. Claramunt, C. Foces-Foces, F. H. Cano y J. Elguero. Protonation of tetrakis(pyrazol-1-yl)-borate in the solid state and in solution. *Rev. Roum. de Chimie*, **9**, 795-805 (1994), Rumania.
173. C. Escolástico, M. D. Santa María, R. M. Claramunt, M. L. Jimeno, I. Alkorta, C. Foces-Foces, F. Hernández Cano y J. Elguero. Imidazole and benzimidazole addition to quinones. Formation of *meso* and *D,L* isomers and crystal structure of the *D,L* isomer of 2,3-bis(benzimidazol-1'-yl)-1,4-dihydroxybenzene. *Tetrahedron*, **50**, 12489-12510 (1994)
174. P. Cabildo, R. M. Claramunt, I. Forfar y J. Elguero. Regioselective adamantylation of *N*-unsubstituted pyrazole derivatives. *Tetrahedron Lett.*, **35**, 183-184, (1994)
175. R. M. Claramunt, C. Escolástico, M. D. Santa María y V. Lopez. Electrochemical behaviour of substituted hydroquinones. *An. Quim.*, **90**, 368-371 (1994)
176. R. M. Claramunt, J. Dotor y J. Elguero. Estructura, reactividad, síntesis de perimidinas y de sus derivados (dihidroperimidinas y perimidinonas). *An. Quim.*, **91**, 151-183 (1995)
177. J. L. Aubagnac, R. M. Claramunt, J. Elguero, I. Gilles, D. Sanz, S. Trofimenko y A. Virgili. Structural characterization of paramagnetic octahedral homoscorpionate (polypyrazolyl borate) cobalt complexes by ¹H and ¹³C NMR spectroscopy and by FAB-mass spectrometry. *Bull. Soc. Chim. Belges*, **104**, 473-482 (1995)
178. R. M. Claramunt, C. López, C. Jaime, A. Virgili, C. Marco y J. Elguero. The conformation of trispyrazolylmethanes: An experimental and theoretical study. *Heterocycles*, **40**, 175-186 (1995)
179. F. Toda, K. Tanaka, L. Infantes, C. Foces-Foces, R. M. Claramunt y J. Elguero. Optical resolution of 1,3-dimethyl-5-phenyl- Δ^2 pyrazoline by diastereoisomeric complex formation with an optically active host compound: X-Ray and molecular structure of the complex. *J. Chem. Soc., Chem Commun.*, 1453-1454 (1995)
180. C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz, R. M. Claramunt, N. Jagerovic, M. L. Jimeno y J. Elguero. Aromatic propellenes. Part 1. NMR spectroscopy, X-ray crystal and molecular structure of hexa(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)-benzene. *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2*, 1359-1363 (1995)
181. A. L. Llamas Saiz, C. Foces-Foces, D. Sanz, R. M. Claramunt, J. Elguero, J. Catalán y J. C. del Valle. 2-Arylperimidine derivatives. Part 1. Synthesis, NMR spectroscopy, X-ray crystal and molecular structures. *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2*, 1389-1398 (1995)
182. R. M. Claramunt, P. Cozzini, P. Domiano, J. Elguero, I. Forfar y A. Fruchier. The structure of 3-amino- Δ^2 -pyrazolines in acid media: X-ray structure of the picrate of 1-phenyl-3-amino- Δ^2 -pyrazoline and the origin of broad signals in ¹H NMR spectrometry. *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2*, 1875-1881 (1995).
183. A. Monge, E. Gutiérrez-Puebla, R. M. Claramunt, C. López, y J. Elguero.

- Molecular structure of Pirkle's alcohol dimer.
J. Chem. Research (S), 390-391 (1995).
J. Chem. Research (M), 2347-2363 (1995)
184. J. Catalán, J. C. del Valle, R. M. Claramunt, M. D. Santa María, V. Bobosik, R. Mocoelo y J. Elguero.
 Towards the photostability mechanism of intramolecular hydrogen bond systems IV: 3(5)-(2'-hydroxy-2'-naphthyl) pyrazoles and 3(5)-(2'-hydroxy-1'-naphthyl) pyrazoles.
J. Org. Chem., **60**, 3427-3439(1995)
185. C. López, D. Sanz, R. M. Claramunt, S. Trofimenko y J. Elguero.
 An ^1H and ^{13}C NMR spectroscopy study of the structure of potassium and thallium salts of tris- and tetrakis-(pyrazol-1-yl)borates in solution. some ^{13}C - ^{11}B and ^{13}C - ^{205}Tl residual coupling constants
J. Organometal. Chem., **503**, 265-276 (1995)
186. J. L. Aubagnac, I. Gilles, R. M. Claramunt, C. Escolástico, D. Sanz y J. Elguero.
 Reduction of aromatic fluorine compounds in fast-atom bombardment mass spectrometry.
Rapid Commun. Mass Sp., **9**, 156-159 (1995)
187. J. L. Aubagnac, I. Gilles, R. Lazaro, R. M. Claramunt, G. Gosselin y J. Martínez.
 Reduction phenomenon in frit FAB mass spectrometry.
Rapid Commun. Mass Sp., **9**, 509-511(1995)
188. G. I. Yranzo, J. D. Pérez, M. A. Ferraris, R. M. Claramunt, P. Cabildo, D. Sanz y J. Elguero.
 Flash vacuum pyrolysis of adamantylazoles.
An. Quim. Int, Ed., **92**, 3-6 (1996)
189. C. T. Supuran, R. M. Claramunt, J. L. Lavandera y J. Elguero.
 Carbonic anhydrase activators. XV. A kinetic study of the interaction of bovine isozyme II with pyrazoles, bis- and tris-azolylmethanes.
Biol. Pharm. Bull., **19**, 1417-1422 (1996)
190. Ch. Janiak, T. G. Scharmann, J. C. Green, R. Parkin, M. J. Kolm, E. Riedel, W. Mickler, J. Elguero, R. M. Claramunt y D. Sanz.
 Effects of nitrogen substitution in poly(pyrazolyl) borate ligands: From orbital energy levels to C-H...O hydrogen bonding.
Chem. Eur. J., **2**, 992-1000 (1996)
191. P. Cabildo, R. M. Claramunt, P. Cornago, J. L. Lavandera, D. Sanz, N. Jagerovic, M. L. Jimeno, J. Elguero, I. Gilles y J. L. Aubagnac.
 Synthesis, structure (NMR and mass spectrometry) and conformational analysis of heterocyclic analogues of dibenzo [a,e] cicloocta-1,5-diene.
J. Chem Soc. Perkin Trans 2, 701-711 (1996)
192. J. Catalán, J. C. del Valle, R. M. Claramunt, D. Sanz y J. Dotor
 Photophysics of the 2-(2'-hydroxyphenyl)perimidine.
J. Lumin., **68**, 165-70 (1996)
193. C. López, J. A. Jiménez, R. M. Claramunt, M. Cano, J. V. Heras, J. A. Campo, E. Pinilla y A. Monge.
 Symmetric and dissymmetric pyrazolyl-bridged rhodium dimers. Two X-ray dirhodium structures representing short metal-metal interactions.
J. Organometal Chem., **511**, 115-127 (1996)
194. D. Sanz, M. D. Santa María, R. M. Claramunt, M. Cano, J. V. Heras, J. A. Campo, F. A. Ruiz, E. Pinilla y A. Monge.
 Rhodium(I) complexes with hydrotris(3-phenylpyrazol-1-yl)borate ligand Tp^{Ph} : X-ray crystal structures of $\text{Tp}^{\text{Ph}}\text{Rh}(\text{NBD})$ and $\text{Tp}^{\text{Ph}}\text{Rh}(\text{COD})$.
J. Organometal Chem., **526**, 341-350 (1996)
195. J. Catalán, C. Díaz, V. López, P. Pérez y R. M. Claramunt.
 The TICT mechanism in 9,9'-biaryl compounds. Solvatochromism of 9,9'-bianthryl, N-(9-anthryl)carbazole, and N,N'-bicarbazyl.
J. Phys. Chem., **100**, 18392-18398 (1996)
196. C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz, C. Escolástico, R. M. Claramunt y J. Elguero.
 Aromatic propellenes. Part 2. A study of conformational isomerism of hexa(pyrazol 1-yl)benzene: X-ray crystallography and semiempirical calculations.
J. Phys. Org. Chem., **9**, 137-144 (1996)

197. F. Toda, K. Tanaka, C. Foces-Foces, L. Infantes, R. M. Claramunt, C. López y J. Elguero.
Host-guest chemistry: The structure of 3(5)-methyl-4-nitropyrazole included in (*R,R*)-(-)-*trans*-4,5-bis(hydroxydiphenyl)-2,2-dimethyl-1,3-dioxacyclopentane.
J. Phys. Org. Chem., 9, 611-618 (1996)
198. C. Foces-Foces, C. Fernández-Castaño, R. M. Claramunt, C. Escolástico y J. Elguero.
Aromatic propellenes. Part 3. NMR, X-ray crystallography and semiempirical calculations on the conformational isomerism of 1,2,4,5-tetrakis(pyrazol-1'-yl)-3,6-bis(3'',5''-dimethylpyrazol-1'-yl)-benzene
J. Phys. Org. Chem., 9, 717-727 (1996)
199. D. Sanz, R. M. Claramunt, J. Glaser, S. Trofimenko y J. Elguero
A multinuclear NMR (¹H, ¹¹B, ¹³C, ¹⁵N and ²⁰⁵Tl) study of thallium hydridotris(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)-borate.
Magn. Res. Chem., 34, 843-846 (1996)
200. C. López, R. M. Claramunt, A. L. Llamas-Saiz, C. Foces-Foces, J. Elguero, I. Sobrados, F. Aguilar-Parrilla y H. H. Limbach.
X-ray diffraction and solid state NMR studies of 1,8-bis(dimethylamino) naphthalene and its complexes with picric and hexafluorophosphoric acids.
New. J. Chem., 20, 523-536 (1996)
201. P. Cabildo, R. M. Claramunt, D. Sanz, J. Elguero, Ch. Enjalbal y J. L. Aubagnac.
Reduction by electron and hydride attachment to doubly charged heterocyclic cations in fast-atom bombardment mass spectrometry. Influence of the matrix.
Rapid Commun. Mass. Sp., 10, 1071-1075 (1996)
202. P. Cornago, C. Escolástico, M. D. Santa María, R. M. Claramunt, C. Fernández-Castaño, C. Foces-Foces, J. P. Fayet y J. Elguero.
Aromatic propellenes. Synthesis, X-ray structures and conformational study of polypyrazolylpyridines.
Tetrahedron, 52, 11075-11094 (1996)
203. L. E. Ochando, J. Rius, D. Louer, R. M. Claramunt, C. López, J. Elguero y J. M. Amigó.
Phase transitions in tris(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)methane. The structure of the high temperature phase from X-ray powder diffraction.
Acta Cryst., B53, 939-944 (1997)
204. J. L. Lavandera, R. M. Claramunt, C. Escolástico, M. D. Santa María, P. Cornago y J. Elguero.
Aromatic propellenes. Part 7. DHPLC: Dynamic high performance liquid chromatography. Application to polypyrazolylbenzenes
Bull. Soc. Chim. Belges, 106, 387-391 (1997)
205. R. M. Claramunt, M. D. Santa María, I. Forfar, F. Aguilar-Parrilla, M. Minguet-Bonvehí, O. Klein, H-H. Limbach, C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz y J. Elguero.
Molecular structure and dynamics of C-1-adamantyl substituted NH-Pyrazoles studied by solid state NMR spectroscopy and X-ray crystallography.
J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2, 1867-1875 (1997)
206. C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz, C. Fernández-Castaño, R. M. Claramunt, C. Escolástico, J. L. Lavandera, M. D. Santa María, M. L. Jimeno y J. Elguero.
Aromatic propellenes. Part 8. Semiempirical calculations and DNMR studies of hexakispyrazolylbenzenes.
J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2, 2173-2177 (1997)
207. P. Cabildo, R. M. Claramunt, D. Sanz, J. L. Lavandera, J. Elguero, Ch. Enjalbal y J. L. Aubagnac.
Positive ion and negative ion FAB (Fast Atom Bombardment) mass spectrometry of some bisazolium salts.
J. Heterocycl. Chem., 34, 367-374 (1997)
208. J. C. del Valle, J. Catalán, C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz, J. Elguero, D. Sanz, J. Dotor y R. M. Claramunt.
Photophysics of the 2-(2''-hydroxyphenyl)perimidines: photostability studies.
J. Lumin., 75, 17-26 (1997)

209. C. Foces-Foces, L. Infantes, R. M. Claramunt, C. López, N. Jagerovic y J. Elguero.
Solid-state structure of NH-pyrazolium hydrochlorides and hydro-bromides by X-ray Crystallography and ^{13}C CPMAS NMR.
J. Mol. Struct., **415**, 81-92 (1997)
210. R. M. Claramunt, D. Sanz, C. López, J. A. Jiménez, M. L. Jimeno, J. Elguero y A. Fruchier
Substituent effects on the ^{15}N NMR parameters of azoles (**Review**).
Magn. Res. Chem., **35**, 35-75 (1997)
211. C. Fernández-Castaño, C. Foces-Foces, F. H. Cano, R. M. Claramunt, C. Escolástico, A. Fruchier y J. Elguero.
The structure, conformation and molecular packing of pyrazolyl-fluorobenzenes and their inclusion compounds.
New, J. Chem., **21**, 195-213 (1997)
212. R. M. Claramunt, S. Trofimenko, I. Rozas y J. Elguero.
Azapentalenes. XLIV. ^1H and ^{13}C NMR study of mesoionic pyrazolo[1,2-a] pyrazoles.
Spectroscopy, **13**, 113-123 (1997)
213. R. M. Claramunt, J. Elguero, C. Escolástico, C. Fernández-Castaño, C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz y M. D. Santa María.
A review on polyazolylbenzenes and related compounds: Propellene-like aromatic compounds.
Targets in heterocyclic systems. Chemistry and properties. Eds. O. A. Attanasi and D. Spinelli, **1**, 1-56 (1997)
214. E. Díez-Barra, J. Dotor, A. de la Hoz, C. Foces-Foces, Ch. Enjalbal, J. L. Aubagnac, R. M. Claramunt y J. Elguero.
 $\text{N,N}'$ -Linked 1,2-ethanediyl-poly(benzimidazolin-2-ones) and the X-ray crystal structure of a benzimidazolin-2-one trimer.
Tetrahedron, **53**, 7689-7704 (1997)
215. J. Quiroga, B. Insausty, C. Foces-Foces, L. Infantes, R. M. Claramunt, P. Cabildo, J. A. Jiménez y J. Elguero.
Structure and tautomerism of 3(5)-amino-5(3)-arylpyrazoles in the solid state and in solution: an X-ray and NMR study.
Tetrahedron, **53**, 10783-10802 (1997)
216. P. Cornago, R. M. Claramunt, M. D. Santa María, I. Alkorta y J. Elguero.
Aromatic propellenes. Part 9. Synthesis and conformational study of hexakis(benzimidazol-1'-yl)benzenes.
Ach-Models in Chemistry, **135**, 475-483 (1998)
217. C. López, Ph. Lorente, H. Benedict, R. M. Claramunt, J. Marín, C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz, J. Elguero y H-H. Limbach.
Localization of hydrogen bond and deuterons in proton sponges by dipolar solid state ^{15}N NMR spectroscopy.
Ber. Bunsen- Ges. Phys. Chem., **102**, 414-418 (1998)
218. R. M. Claramunt y M. D. Santa María
Microondas en química.
100CIAS@UNED, **1**, 90-94 (1998)
219. J. Catalán, C. Díaz, V. López, P. Pérez y R. M. Claramunt.
On the TICT mechanism of 9,9'-biaryl compounds.
Eur. J. Org. Chem., **1**, 1697-1704 (1998)
220. R. M. Claramunt, D. Sanz, M. D. Santa María, J. A. Jiménez, M. L. Jimeno y J. Elguero.
A multinuclear NMR study (^1H , ^{13}C , ^{15}N) of 1-monosubstituted pyrazoles.
Heterocycles, **47**, 301-314 (1998)
221. L. Infantes, C. Foces-Foces, P. Cabildo, R. M. Claramunt, O. Mó, M. Yáñez y J. Elguero.
The problem of the structure of aminoazoles. Crystal and molecular structure of two polymorphic forms of 4-aminopyrazole.

- Heterocycles*, **49**, 157-168 (1998)
222. C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz, R. M. Claramunt, P. Cabildo y J. Elguero.
Studies of intramolecular hydrogen bonds (IMHB). Crystal and molecular structure of 2-(2'-hydroxyphenyl) imidazoles.
J. Mol. Struct., **440**, 193-202 (1998)
223. L. Infantes, C. Foces-Foces, R. M. Claramunt, C. López y J. Elguero.
Tautomerism of NH-pyrazolinones in the solid state: the case of 3(5)-ethoxycarbonyl-5(3)-hydroxypyrazole.
J. Mol. Struct., **447**, 71-79 (1998)
224. M. Begtrup, Th. Balle, R. M. Claramunt, D. Sanz, J. A. Jiménez, O. Mó, M. Yañez y J. Elguero.
GIAO *ab initio* calculations of nuclear shieldings of monosubstituted benzenes and *N*-substituted pyrazoles.
J. Mol. Struct. Theochem, **453**, 255-273 (1998)
225. M. L. Jimeno, I. Alkorta, J. Elguero, J. E. Anderson, R. M. Claramunt y J. L. Lavandera.
Conformation of 5,6,11,12-tetrahydridibenzo[a,e]cyclooctene: An experimental and theoretical study.
New. J. Chem., **22**, 1079-1083 (1998)
226. R. M. Claramunt, J. L. Lavandera, D. Sanz, J. Elguero y M. L. Jimeno.
Conformational analysis of heterocyclic analogues of 5,6,11,12-tetrahydridibenzo[a,e]cyclooctene: 6,7,14,15-tetrahydrobisbenzimidazo [1,2-a:1',2'-e][1,5]diazocine and 6,7,13,14-tetrahydrobispyrido [1,2-a:1',2'-e] diazocinediium dibromide.
Tetrahedron, **54**, 9569-9580 (1998)
227. C. Foces-Foces, P. Cabildo, R. M. Claramunt, y J. Elguero.
4-(1*H*-1,2,4-triazol-1-yl)phenol.
Acta Cryst. C, 1160-1163 (1999)
228. R. M. Claramunt y J. Elguero.
El lenguaje de la química.
100CIAS@UNED, **2**, 87-90 (1999)
229. C. López, R. M. Claramunt, S. A. Bourne y J. Elguero.
1-D and 2-D-Networks based on bis- and tris-(2-*R*-benzimidazol-1-yl)methanes.
Crystal Engineering, **2**, 197-213 (1999)
230. O. Hager, A. L. Llamas-Saiz, C. Foces-Foces, R. M. Claramunt, C. López y J. Elguero.
Complexes between 1,1'-binaphthyl-2,2'-dicarboxylic acid and pyrazoles: a case of manual sorting of conglomerate crystals (triage).
Helv. Chim. Acta, **82**, 2213-2230 (1999)
231. L. Infantes, C. Foces-Foces, R. M. Claramunt, C. López, N. Jagerovic y J. Elguero.
Packing modes in eight 3-ethoxycarbonylpyrazole derivatives. Influence of the substituents on the crystal structure and annular tautomerism.
Heterocycles, **50**, 227-242 (1999)
232. R. M. Claramunt, I. Alkorta y J. Elguero.
Fluoropyrazoles: an *ab initio* study.
Heterocycles, **51**, 355-360 (1999)
233. R. M. Claramunt, I. Forfar, P. Cabildo, J. Lafuente, J. Barberá, R. Giménez y J. Elguero.
Synthesis and mesogenic properties of Schiff bases derived from aminopyrazoles.
Heterocycles, **51**, 751-762 (1999)
234. J. Quiroga, B. Insausti, A. Hormaza, P. Cabildo, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Synthesis, molecular structure and tautomerism of 1(2)*H*-dihydro-pyrazolo[3,4-*b*]pyridin-6-ones.
Heterocyclic Communications, **5**, 115-122 (1999)
235. M. A. V. Ribeiro da Silva, M. D. M. C. Ribeiro da Silva, P. Jiménez, M. V. Roux, J. Elguero, R. Claramunt, P. Cabildo y A. Sánchez-Migallón.

- Enthalpies of combustion, heat capacities, and enthalpies of vaporization of 1-ethylimidazole and 1-ethylpyrazole.
J. Chem. Thermodyn., **31**, 129-138 (1999)
236. L. Infantes, C. Foces-Foces, R. M. Claramunt, C. López y J. Elguero.
Aminopyrazoles and their conjugated acids: An X-ray study of 3,5-dimethyl-4-aminopyrazole and the picrate of 3(5)-aminopyrazole.
J. Heterocyclic Chem., **36**, 595-600 (1999)
237. C. Foces-Foces, C. Fernández-Castaño, R. M. Claramunt, C. Escolástico y J. Elguero.
Host-guest properties of the aromatic propellene 1,4-bis(pyrazol-1'-yl)-2,3,5,6-tetrakis(3'',5''-dimethylpyrazol-1'-yl) benzene.
J. Incl. Phenomen., **33**, 169-189 (1999)
238. M. D. Santa María, P. Cornago, R. M. Claramunt, J. Elguero, C. Fernández-Castaño y C. Foces-Foces.
Aromatic propellenes. Part. 10. Conformational study of hexa(imidazol-1-yl)- and hexakis(2-methylimidazol-1-yl)-benzenes by NMR and AM1 calculations.
J. Mol. Struct., **478**, 285-294 (1999)
239. O. Mó, M. Yañez, M. V. Roux, P. Jiménez, J. Z. Dávalos, M. A. V. Ribeiro da Silva, M. D. M. C. Ribeiro da Silva, M. A. R. Matos, L. M. P. F. Amaral, A. Sánchez-Migallón, P. Cabildo, R. M. Claramunt, J. Elguero y J. F. Liebman.
Enthalpies of formation of *N*-substituted pyrazoles and imidazoles.
J. Phys. Chem. A, **103**, 9336-9344 (1999)
240. D. Sanz, M. A. Ponce, R. M. Claramunt, C. Fernández-Castaño, C. Foces-Foces y J. Elguero.
Synthesis and structural studies of symmetric and unsymmetric adamantylmethyleneazines.
J. Phys. Org. Chem., **12**, 455-469 (1999)
241. R. Goddard, R. M. Claramunt, E. Escolástico y J. Elguero.
Structures of NH-pyrazoles bearing only C-methyl substituents: 4-methylpyrazole is a hydrogen-bonded trimer in the solid.
New J. Chem., 237-240 (1999)
242. J. A. Jiménez, R. M. Claramunt, O. Mó, M. Yañez, F. Wehrmann, G. Buntkowsky, H.-H. Limbach, R. Goddard y J. Elguero.
The structure of *N*-aminopyrazole in the solid state and in solution: An experimental and computational study.
Phys. Chem. Chem. Phys., **1**, 5113-5120 (1999)
243. P. Cabildo, D. Sanz, R. M. Claramunt, S. A. Bourne, I. Alkorta y J. Elguero.
Synthesis and structural studies of some [1₄]paracyclo-bis-(1,2)pyrazolium- and (1,3)imidazolium-phanes.
Tetrahedron, **55**, 2327-2340 (1999)
244. C. Escolástico, M. A. Torres, M. D. Santa María, R. M. Claramunt, N. Jagerovic, J. Elguero y R. Sastre.
Spectroscopic properties of two highly substituted PAH heteroanalogs. Octakis(pyrazol-1-yl)-naphthalene and octakis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)naphthalene.
Arkivoc, **1**, 612-626 (2000)
245. C. Enjalbal, J. L. Aubagnac, M. Pérez-Torralba, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
FAB mass spectrometry of 6-aminofulvene-2-aldehydes: non classical aromatic compounds?.
Arkivoc, **v1**, 843-853 (2000)
246. R. M. Claramunt.
Química y novela policiaca.
100CIAS@UNED, **3**, 40-44 (2000)
247. R. M. Claramunt, C. López, M. A. García, M. Pierrot, M. Giorgi y J. Elguero.
3(5)-(1-Adamantyl)pyrazoles: Chemistry and molecular structure.
J. Chem. Soc., Perkin Trans. 2, 2049-2053 (2000)
248. M. A. V. Ribeiro da Silva, M. D. M. C. Ribeiro da Silva, M. A. R. Matos, P. Jiménez, M. V. Roux, M. A. Martín-Luengo, J. Elguero, R. M. Claramunt y P. Cabildo.
Enthalpies of combustion, heat capacities, and enthalpies of vaporisation of 1-phenylimidazole and 1-phenylpyrazole.

- J. Chem. Thermodyn.*, **32**, 237-245 (2000)
249. C. Foces-Foces, S. Trofimenko, C. López, M. D. Santa María, R. M. Claramunt y J. Elguero.
The structure at 150K of a highly disordered pyrazole: 3-Trifluoromethyl-5-(2-thienyl)-pyrazole.
J. Mol. Struct., **526**, 59-64 (2000)
250. M. D. Santa María, R. M. Claramunt, J. A. Campo, M. Cano, R. Criado, J. V. Heras, P. Ovejero, E. Pinilla y M. R. Torres.
Rhodium complexes with hydrotris(3-*p*-anisylpyrazol-1-yl)borate ligand Tp^{p-An} . Intramolecular C–H bond activation and dehydrochlorination processes.
J. Organomet. Chem., **605**, 117-126 (2000)
251. S. H. Alarcón, J. A. Jiménez, R. M. Claramunt, H.-H. Limbach y J. Elguero.
Combined variable-temperature and variable-field ^{15}N cross-polarization magic angle spinning NMR study of ^{15}N , ^{14}N residual dipolar coupling in pyrazole derivatives.
Magn. Reson. Chem., **38**, 305-310 (2000)
252. M. A. García, C. López, O. Peters, R. M. Claramunt, O. Klein, D. Schagen, H.-H. Limbach, C. Foces-Foces y J. Elguero.
Triple proton transfer in crystalline 3,5-dibromo-1*H*-1,2,4-triazole and 3,5-dichloro-1*H*-1,2,4-triazole studied by variable temperature ^{15}N NMR and *ab initio* calculations.
Magn. Reson. Chem., **38**, 604-614 (2000)
253. C. López, R. M. Claramunt, I. Alkorta y J. Elguero.
Solution and solid state (CPMAS) NMR studies of the tautomerism of six-membered heterocyclic compounds related to 2-pyridones.
Spectroscopy, **14**, 121-126 (2000)
254. J. A. Jiménez, R. M. Claramunt, C. Escolástico y J. Elguero.
Some considerations about the structure of 3(5)-methylpyrazole.
Struct. Chem., **11**, 77-83 (2000)
255. V. Milata, R. M. Claramunt, J. Elguero y P. Zálupsky.
Chemical structure and antibacterial activity of 4-quinolones: Incidence in nature, preparation and properties.
Targets in Heterocyclic Systems. Chemistry and Properties. Eds. O. A. Attanasi and D. Spinelli, **4**, 167-203 (2000)
256. R. M. Claramunt.
Fármacos y medicamentos en el siglo XXI.
A Distancia, **19**, 51-56 (2001)
257. R. M. Claramunt, D. Sanz y J. Elguero.
Reactivity of *N*-aminoazoles towards 1-bromoadamantane.
An. Asoc. Quím. Argentina, **89**, 15-22 (2001)
258. R. M. Claramunt, D. Sanz, S. H. Alarcón, M. Pérez-Torralla, J. Elguero, C. Foces-Foces, M. Pietrzak, U. Langer y H.-H. Limbach.
6-Aminofulvene-1-alimine: A model molecule for the study of intramolecular hydrogen bonds.
Angew. Chem. Int. Ed., **40**, 420-423 (2001)
Angew. Chem., **113**, 434-437 (2001)
259. R. M. Claramunt, C. Escolástico y J. Elguero.
Addition of 3(5)-methylpyrazole to *p*-benzoquinone.
Arkivoc, **2**, part. 1, 945-951 (2001)
260. R. M. Claramunt, C. Escolástico y J. Elguero.
Methylation of (1-azolyl)-1,4-dihydrobenzenes.
Arkivoc, **2**, part. 1, 1012-1023 (2001)
261. V. Milata, R. M. Claramunt, P. Cabildo, M. D. Santa María, P. Cornago, L. Infantes, F. H. Cano y J. Elguero.
2,4,6-Tris(azol-1-yl)-1,3,5-triazines: A new class of multidentate ligands.
Heterocycles, **55**, 905-924 (2001)
262. R. M. Claramunt, C. López, D. Sanz, J. Elguero e I. Alkorta.

- A multinuclear NMR spectral study of parent azoles and benzazoles: Experimental results and GIAO *ab initio* calculations.
Heterocycles, **55**, 2109-2121 (2001)
263. M. Pietrzak, J. Wheling, H.-H. Limbach, N. S. Golubev, C. López, R. M. Claramunt y J. Elguero.
¹³C detected scalar nitrogen-nitrogen couplings across the intramolecular symmetric NHN-hydrogen bond of proton sponge.
J. Am. Chem. Soc., **123**, 4338-4339 (2001)
264. R. M. Claramunt, D. Sanz, I. Alkorta, J. Elguero, C. Foces-Foces y A. L. Llamas-Saiz.
Ab initio study of azolides: Energetic and spectroscopic properties.
J. Heterocycl. Chem., **38**, 443-450 (2001)
265. M. Pietrzak, H.-H. Limbach, M. Pérez-Torralla, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Scalar coupling constants across the intramolecular NHN hydrogen bond of symmetrically and non-symmetrically substituted 6-aminofulvene-1-aldimines.
Magn. Reson. Chem., **39**, S100-S108 (2001)
266. S. Trofimenko, A. L. Rheingold, L. M. Liable-Sands, R. M. Claramunt, C. López, M. D. Santa María y J. Elguero.
The molecular structure of 4-*tert*-butylpyrazoles in the solid state and in solution: An X-ray, NMR and calorimetric study of the buttressing effect of a 4-*tert*-butyl substituent.
New. J. Chem., **25**, 819-823 (2001)
267. R. M. Claramunt, C. López, M. A. García, M. D. Otero, M. R. Torres, E. Pinilla, S. H. Alarcón y J. Elguero.
The structure of halogeno-1,2,4-triazoles in the solid state and in solution.
New. J. Chem., **25**, 1061-1068 (2001)
268. R. M. Claramunt, C. López, A. Schmidpeter, A. Wilhelm, J. Elguero e I. Alkorta.
¹³C and ¹⁵N NMR shieldings of 1,2,4-diazaphospholes in the solid state and in solution.
Spectroscopy, **15**, 27-32 (2001)
269. T. Mas, R. M. Claramunt, M. D. Santa María, D. Sanz, S. H. Alarcón, M. Pérez-Torralla y J. Elguero.
Structure and spectroscopy of imidazo[1,2-*a*]imidazoles and imidazo[1,2-*a*] benzimidazoles.
Arkivoc, **v**, 48-61 (2002)
270. S. P. Brown, M. Pérez-Torralla, D. Sanz, R. M. Claramunt y L. Emsley.
Determining hydrogen-bond strengths in the solid state by NMR. The quantitative measurement of homonuclear *J* couplings.
Chem. Commun., 1852-1853 (2002)
271. S. P. Brown, M. Pérez-Torralla, D. Sanz, R. M. Claramunt y L. Emsley.
H-Bonding in solid detected by NMR.
Chem. Eng. News, **27**, 26 (2002)
272. R. M. Claramunt.
Las mujeres premio Nobel en Química: Dorothy Crowfoot-Hodgkin o el triunfo de la cristalografía.
100CIAS@UNED, **5**, 116-130 (2002)
273. A. M. Guerrero, F. A. Jalón, B. R. Manzano, R. M. Claramunt, M. D. Santa María, C. Escolástico, J. Elguero, A. M. Rodríguez, M. A. Maestro y J. Mahía.
Variety in the coordination modes of the ligand Hexakis(Pyrazol-1-yl)Benzene (HPZB) to Pd^{II}, Pt^{II} and Cu^I centres.
Eur. J. Inorg. Chem, 3178-3189 (2002)
274. M. A. García, C. López, R. M. Claramunt, A. Kenz, M. Pierrot y J. Elguero.
Polymorphism *versus* desmotropy: The case of 3(5)-phenylpyrazole and 3-phenylindazole.
Helv. Chim. Acta, **85**, 2763-2776 (2002)
275. C. Enjalbal, P. Sanchez, J. Martínez, J.-L. Aubagnac, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Utilization of charge and mass labelling for the structural identification by mass spectrometry of heterocyclic quaternary salts.
Int. J. Mass Spectrom. Ion Process., **219**, 391-401 (2002)

276. S. P. Brown, M. Pérez Torralba, D. Sanz, R. M. Claramunt y L. Emsley.
The observation of a hydrogen-bond mediated ^{15}N - ^{15}N J coupling in the solid state by NMR.
J. Am. Chem. Soc., **124**, 1152-1153 (2002)
277. R. M. Claramunt, M. D. Santa María, L. Infantes, F. H. Cano y J. Elguero.
The annular tautomerism of 4(5)-phenylimidazole.
J. Chem. Soc., Perkin Trans 2, 564-568 (2002)
278. R. M. Claramunt, P. Cornago, D. Sanz, M. D. Santa María, C. Foces-Foces, I. Alkorta y J. Elguero.
1-Benzoylazoles: An experimental (NMR and crystallography) and theoretical study.
J. Mol. Struct., **605**, 199-212 (2002)
279. D. Sanz, M. Pérez-Torralba, S. H. Alarcón, R. M. Claramunt, C. Foces-Foces y J. Elguero.
Tautomerism in the solid state and in solution of a series of 6-aminofulvene-1-aldimines.
J. Org. Chem., **67**, 1462-1471 (2002)
280. N. Jagerovic, M. L. Jimeno, I. Alkorta, J. Elguero y R. M. Claramunt.
An experimental (NMR) and theoretical (GIAO) study of the tautomerism of benzotriazole in solution.
Tetrahedron, **58**, 9089-9094 (2002)
281. R. M. Claramunt, C. López, J. Elguero, A. L. Rheingold, L. N. Zakaharov y S. Trofimenko.
Structure of 3(5)-[4-diphenylphosphinoyl]phenylpyrazole in the solid state (X-ray and CPMAS NMR) and in solution (NMR) tautomerism and hydrogen bonds.
Arkivoc, 209-219, (2003)
282. A. Guerrero, F. A. Jalón, B. R. Manzano, R. M. Claramunt, P. Cabildo, L. Infantes, F. H. Cano y J. Elguero.
Structure of tris(3',5'-dimethylpyrazol-1-yl)-s-triazine and its use as ligand in coordination chemistry.
Chem. Heterocycl. Compd., **436**, 1584-1591, (2003)
283. R. M. Claramunt, P. Cornago, M. Cano, J. V. Heras, M. L. Gallego, E. Pinilla Y M. R. Torres.
New Tris(pyrazolyl)triazine and pyrazolopyridine gold(I) and palladium (II) derivatives based on the 3,5-bis(4-butoxyphenyl)pyrazole group-architectures with different types of bonding interactions.
Eur. J. Inorg. Chem., 2693-2704 (2003)
Eur. J. Inorg. Chem., 3831 (2003) [Correction]
284. R. M. Claramunt, D. Sanz, M. Pérez-Torralba, J. Elguero, P. Sánchez, C. Enjalbal, J. Martínez y J. L. Aubagnac.
Electrospray mass spectrometry of 2-aminotroponimines and 2-aminotropones.
Eur. J. Mass Spectrom. **9**, 403-407, (2003)
285. W. Holzer, K. Hahn, T. Brehmer, R. M. Claramunt y M. Pérez-Torralba.
The structure of 4-benzoyl-5-methyl-2-phenylpyrazol-3-one oxime and methyl derivatives.
Eur. J. Org. Chem., 1209-1219, (2003)
286. A. Sánchez-Migallón, A. de la Hoz, C. López, R. M. Claramunt, L. Infantes, S. Motherwell, K. Shankland, H. Nowell, I. Alkorta y J. Elguero.
The structure of N^1 -hydroxylophine N^3 -oxide(=1-hydroxy-2,4,5-triphenyl-1*H*-imidazole-3-oxide) in solid state.
Helv. Chim. Acta, **86**, 1026-1039 (2003)
287. M. C. Carrión, A. Guerrero, F. A. Jalón, B. R. Manzano, A. de la Hoz, R. M. Claramunt, V. Milata y J. Elguero.
Five different fluxional processes in polyfluorophenyl palladium(II) complexes with 2,4,6-tris(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)-1,3,5-triazine. The driving effect of the solvent.
Inorg. Chem., **42**, 885-895, (2003)
288. A. Caballero, A. Guerrero, F. A. Jalón, B. R. Manzano, R. M. Claramunt, M. D. Santa María, C. Escolástico y J. Elguero.
Multinuclear NMR solution studies on complexes of hexakis(pyrazol-1-yl)benzene (HPZB) with Ag (I).
Inorg. Chem. Acta, **347**, 166-174 (2003)
289. W. Holzer, R. M. Claramunt, M. Pérez-Torralba, D. Guggi y T. Brehmer.
Spiro-fused (C2)-aziridino-(C4)-pyrazolones, a new heterocyclic system. Synthesis, spectroscopic studies an X-ray structure analysis.

- J. Org. Chem.*, **68**, 7943-7950 (2003)
290. M. H. Holschbach, D. Sanz, R. M. Claramunt, L. Infantes, S. Motherwell, P. R. Raithby, M. L. Jimeno, D. Herrero, I. Alkorta, N. Jagerovic y J. Elguero.
Structure of 4-nitroso-5-aminopyrazole and its salts: Tautomerism, protonation, and *E/Z* isomerism.
J. Org. Chem., **68**, 8831-8837 (2003)
291. O. Mó, M. Yáñez, J. Elguero, M. V. Roux, P. Jiménez, J. Z. Dávalos, M. A. V. Ribeiro da Silva, M. D. Ribeiro da Silva, P. Cabildo y R. Claramunt.
Substituents effects on enthalpies of formation: Benzene derivatives.
J. Phys. Chem. A, **107**, 366-371, (2003)
292. R. M. Claramunt, C. López, M. A. García, G. S. Denisov, I. Alkorta y J. Elguero.
Protonation and phase effects on the NMR chemical shifts of imidazoles and pyrazoles: Experimental results and GIAO calculations.
New. J. Chem., **27**, 734-742 (2003)
293. D. Sanz, J. A. Jiménez, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Multidentate ligands from *N*-hydroxy and *N*-aminopyrazole.
Arkivoc, **5**, 100-108 (2004)
294. R. M. Claramunt, F. Herranz, M. D. Santa María, C. Jaime, M. de Federico y J. Elguero.
Towards the design of host-guest complexes: Biotin and urea derivatives *versus* artificial receptors.
Biosens. Bioelectron., **20**, 1242-1249, (2004)
295. C. López, R. M. Claramunt, M. A. García y J. Elguero.
Pyrazoles as molecular probes to study the properties of co-crystals by solid state NMR spectroscopy.
Central European Journal of Chemistry, **2**, 660-671, (2004)
296. J. Catalán, J. L. G. de Paz, J. C. del Valle, R. M. Claramunt y T. Mas.
On photoinduced double-proton transfer reactions: The photophysics of 9*H*-imidazo[1,2-*a*]benzimidazole dimer".
Chemical Physics, **305**, 175-185, (2004)
297. A. Guerrero, F. A. Jalón, B. R. Manzano, A. Rodríguez, R. M. Claramunt, P. Cornago, V. Milata y J. Elguero.
Apparent allyl rotation in new allylpalladium (II) complexes with pyrazolyl *N*-donors.
Eur. J. Inorg. Chem., 549-556, (2004)
298. R. M. Claramunt, D. Sanz, M. Pérez-Torralba, E. Pinilla, M. R. Torres y J. Elguero.
Solid-state structure and tautomerism of 2-aminotroponimines studied by X-ray crystallography and multinuclear NMR spectroscopy.
Eur. J. Org. Chem., 4452-4466, (2004)
299. M. A. V. Ribeiro da Silva, M. D. M. C. Ribeiro da Silva, L. M. P. F. Amaral, P. Jimenez, M. V. Roux, J. Z. Dávalos, M. Temprado, P. Cabildo, R. M. Claramunt, J. Elguero, O. Mó y M. Yáñez.
Experimental thermochemical study of two 2-alkylbenzimidazole isomers (alkyl= propyl and isopropyl).
J. Chem. Thermodyn., **36**, 533-539, (2004)
300. S. H. Alarcón, A. C. Olivieri, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Substituent and solvent effects on the proton transfer equilibrium in anils and azo derivatives of naphthol. Multinuclear NMR study and theoretical calculations.
J. Mol. Struct., **705**, 1-9 (2004)
301. R. M. Claramunt, D. Sanz, M. D. Santa María, J. Elguero y S. Trofimenko.
A multinuclear NMR study in the solid state and in solution of thallium(I) tris-(pyrazol-1-yl)borates (thallium scorpionates).
J. Organomet. Chem., **689**, 463-470 (2004)
302. P. Jiménez, M. V. Roux, J. Z. Dávalos, M. Temprado, M. A. V. Ribeiro da Silva, M. D. M. C. Ribeiro da Silva, L. M. P. F. Amaral, P. Cabildo, R. M. Claramunt, O. Mó, M. Yáñez y J. Elguero.
Substituent and ring effects on enthalpies of formation: 2-Methyl- and 2-ethylbenzimidazoles *versus* benzene- and imidazole-derivatives.
Molecular Physics, **102**, 711-721, (2004)
303. R. M. Claramunt, C. López, I. Alkorta, J. Elguero, R. Yang y S. Schulman.
The tautomerism of omeprazole in solution: A ¹H and ¹³C NMR study.

- Magn. Reson. Chem.*, 42, 712-714, (2004)
304. C. Álvarez-Rúa, S. García-Granda, S. Goswami, R. Mukherjee, S. Dey, R. M. Claramunt, M. D. Santa María, I. Rozas, N. Jagerovic, I. Alkorta y J. Elguero.
Multiple hydrogen bonds and tautomerism in naphthyridine derivatives.
New J. Chem., 28, 700-707, (2004)
305. R. M. Claramunt, M. D. Santa María, J. Elguero y S. Trofimenko.
Isomer distribution in thallium hydrotris(polymethylene pyrazol-1-yl)borates (thallium scorpionates): A multinuclear NMR study.
Polyhedron, 23, 2985-2991 (2004)
306. W. Holzer, C. Kautsch, C. Laggner, R. M. Claramunt, M. Pérez-Torrallba, I. Alkorta and J. Elguero.
On the tautomerism of pyrazolones: the geminal 2J [pyrazole C-4,H-3(5)] spin coupling constant as a diagnostic tool.
Tetrahedron, 60, 6791-6805, (2004)
307. R. M. Claramunt, M. A. García, C. López, J. Elguero.
The structure of 3,5-dimethylpyrazole/carboxylic acids co-crystals.
Arkivoc, vii, 91-101, (2005)
308. P. Cornago, R. M. Claramunt, M. Cano, J. V. Heras y M. L. Gallego.
Multinuclear NMR study of Au(I), Pd(II) and Ag(I) pyrazole complexes to investigate the coordination mode.
Arkivoc, ix, 21-29, (2005)
309. G. P. A. Yap, F. A. Jove, R. M. Claramunt, D. Sanz, I. Alkorta and J. Elguero.
The X-ray molecular structure of 1-(2',4'-dinitrophenyl)1,2,3-triazole and the problem of the orthogonal interaction between a "pyridine-like" nitrogen and nitro group.
Austr. J. Chem. 58, 817-822, (2005)
310. E. Quintanilla, J. Z. Dávalos, J. L. M. Abboud, M. Alcamí, M. P. Cabildo, R. M. Claramunt, O. Mó y M. Yáñez.
Why does pivalaldehyde (trimethylacetaldehyde) unexpectedly seems more basic than 1-adamantanecarbaldehyde in the gas phase? A FT-ICR and high-level *ab initio* study.
Chem. Eur. J. 11, 1826-1832, (2005)
311. L. Gallego, M. Cano, J. V. Heras, E. Pinilla, M. R. Torres, P. Cornago and R. M. Claramunt.
Cationic silver coordination compounds of polydentate ligands. Supramolecular structures of [Ag(pypz^{bp2})₂(OSO₂CF₃)] and [Ag₂(pypz^{bp2})₂(OSO₂CF₃)] (pypz^{bp2}=2-[3,5-bis(4-butoxyphenyl)pyrazol-1-yl]pyridine).
Eur. J. Inorg. Chem., 4370-4381 (2005)
312. R. M. Claramunt, C. López, S. Lott, M. D. Santa María, I. Alkorta and J. Elguero.
Solid State NMR study of the tautomerism of acetylacetone included in a host matrix.
Helv. Chim. Acta, 88, 1931-1942, (2005)
313. M. A. V Ribeiro da Silva, M. D. Ribeiro da Silva, L. M. P. F. Amaral, J. Elguero, P. Jiménez, M. V. Roux, J. Z. Dávalos, M. Temprado, P. Cabildo, R. M. Claramunt, O. Mó, O. y M. Yáñez.
Thermochemical properties of two benzimidazole derivatives: 2-Phenyl and 2-Benzylbenzimidazole.
J. Chem. Thermodyn., 37, 1168-1176, (2005)
314. M. A. Farrán, R. M. Claramunt, C. López, E. Pinilla, M. R. Torres, J. Elguero.
Structural characterization of 2,3-disubstituted pyrazines: NMR and X-ray crystallography.
J. Mol. Struct., 741, 67-75, (2005)
315. R. M. Claramunt, M. A. García, C. López, S. Trofimenko, G. P. A. Yap, I. Alkorta and J. Elguero.
The tautomerism of 1*H*-pyrazole-3(5)-(N-*tert*-butyl)carboxamide in solid state and in solution.
Magn. Reson. Chem. 43, 89-91, (2005)
316. R. M. Claramunt, D. Sanz, I. Alkorta and J. Elguero.
A theoretical study of multinuclear coupling constants in pyrazoles.
Magn. Reson. Chem. 43, 985-991, (2005)
317. D. Sanz, R. M. Claramunt, S. P. Singh, V. Kumar, R. Aggarwal, J. Elguero and I. Alkorta .

- Structure of the products of condensation of hydroxylamine with trifluoromethyl- β -diketones: assignments of the diastereotopic protons of the 4-methylene group in 5-hydroxy-5-trifluoromethyl- Δ^2 -isoxazolidines.
Magn. Reson. Chem. **43**, 1040-1043, (2005)
318. D. Sanz, A. Perona, R. M. Claramunt and J. Elguero .
Synthesis and spectroscopic properties of Schiff bases derived from 3-hydroxy-4-pyridinecarboxaldehyde.
Tetrahedron, **61**, 145-154, (2005)
319. R. M. Claramunt, F. Herranz, M. D. Santa María, E. Pinilla, M. R. Torres, J. Elguero.
Molecular recognition of biotin, barbital and tolbutamide with new synthetic receptors.
Tetrahedron, **61**, 5089-5100, (2005)
320. O. Prakash, A. Kumar, A. Sadana, R. Prakash, S. P. Singh, R. M. Claramunt, D. Sanz, I. Alkorta, and J. Elguero .
Study of the reaction of chalcone analogs of dehydroacetic acid and *o*-aminothiophenol: synthesis and structure of 1,5-benzothiazepines and 1,4-benzothiazines.
Tetrahedron, **61**, 6642-6651, (2005)
321. E. Pinilla, M. R. Torres, R. M. Claramunt, D. Sanz, O. Prakash, S. P. Singh, J. Elguero y I. Alkorta.
The structure of 2,3-dihydro-3-(2,4-dioxo-6-methylpyran-3-ylidene)-2-(2-nitrobenzyl)-1,4-benzothiazine and the problem of orthogonal interactions.
Arkivoc, **ii**, 136-142 (2006)
322. M. A. P. Martins, N. Zanatta, H. G. Bonaccorso, F. A. Rosa, R. M. Claramunt, M. A. García, M. D. Santa María, y J. Elguero.
The structure in the solid state and in solution of 3(5)-trifluoromethyl-4,5(3)-polymethylenepyrazoles.
Arkivoc, **iv**, 29-37, (2006)
323. R. M. Claramunt, C. López y J. Elguero.
The structure of Omeprazole in the solid state: a ^{13}C and ^{15}N NMR/CPMAS study.
Arkivoc, **v**, 5-11 (2006)
324. R. M. Claramunt, D. Sanz, S. Aggarwal, A. Kumar, O. Prakash, S. P. Singh y J. Elguero .
The reaction of *o*-phenylenediamine with α,β -unsaturated carbonyl compounds.
Arkivoc, **xiv**, 35-45 (2006)
325. D. Sanz, A. Perona, R.M. Claramunt, E. Pinilla, M. R. Torres and J. Elguero.
Solid-State and Solution Structural Studies of 4 {[C(E)]-1H-Azol-1-ylimino)methyl}pyridin-3-ols.
Helv. Chim. Acta, **89**, 1290-1303 (2006)
326. F. Herranz, M. D. Santa María, R. M. Claramunt.
Molecular Recognition: Improved binding of Biotin Derivatives with Synthetic Receptors.
J. Org. Chem., **71**, 2944-2951 (2006)
327. R. M. Claramunt, P. Cornago, V. Torres, E. Pinilla, M. R. Torres, A. Samat, V. Lokshin, M. Valés and J. Elguero.
The structure of pyrazoles in the solid state: A combined CPMAS, NMR, and crystallographic study.
J. Org. Chem., **71**, 6881-6891 (2006)
328. L. Infantes, O. Mó, M. Yáñez, M. V. Roux, P. Jiménez, J. Z. Dávalos, M. Temprado, M. A. V. Ribeiro da Silva, M. D. Ribeiro da Silva, L. M. P. F. Amaral, P. Cabildo, R. M. Claramunt y J. Elguero.
Substituent effects on enthalpies of formation of nitrogen heterocycles: 2-substituted benzimidazoles and related compounds.
J. Phys. Chem. A, **110**, 2535-2544 (2006)
329. R. M. Claramunt, M. D. Santa María, D. Sanz, I. Alkorta and J. Elguero.
A ^1H , ^{13}C and ^{15}N NMR study in the solid state and in solution of six *N*-substituted pyrazoles and indazoles.
Magn. Reson. Chem., **44**, 566-570 (2006)
330. P. Navarro, F. Reviriego, I. Alkorta, J. Elguero, C. López, R. M. Claramunt and E. García-España.
The structure of ammonium pyrazolates in the solid state
Magn. Reson. Chem., **44**, 1067-1072 (2006)

331. C. Pérez Medina, C. López y R. M. Claramunt
Theoretical Studies on the Tautomerism of 1,5,6,7-Tetrahydro-4*H*-indazol-4-ones
Molecules, **11**, 415-420 (2006)
332. A. Perona, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero
Syntheses and Structural Studies of Schiff Bases Involving Hydrogen Bonds
Molecules, **11**, 453-463 (2006)
333. F. Herranz, M. D. Santa María y R. M. Claramunt
Host-Guest Chemistry of Tolbutamide
Molecules, **11**, 478-485 (2006)
334. R. M. Claramunt, P. Cornago, M. D. Santa María, V. Torres, E. Pinilla, M. R. Torres y J. Elguero
The Structure of a Non-Symmetric Disordered Tetramer: A Crystallographic and Solid State Multinuclear NMR Study of the Properties of 3(5)-Ethyl-5(3)-Phenyl-1*H*-pyrazole
Supramolecular Chemistry, **18**, 349-356 (2006)
335. R. M. Claramunt, C. López, C. Pérez-Medina, E. Pinilla, M. R. Torres y J. Elguero.
Synthesis and structural study of tetrahydroindazolones
Tetrahedron, **62**, 11704-11713 (2006)
336. F. Herranz, M. D. Santa María y R. M. Claramunt.
A new tool for the rational design of methylbiotin hosts
Tetrahedron Lett., **47**, 9017-9020 (2006)
337. F. J. Zúñiga, L. Palatinus, P. Cabildo, R. M. Claramunt, y J. Elguero.
The Molecular Structure of 2-Phenylbenzimidazole: a New Example of Incommensurate Modulated Intramolecular Torsion
Z. Kristallogr., **221**, 281-287, (2006)
338. S. Trofimenko, R. M. Claramunt, M. D. Santa María y Elguero.
A multinuclear magnetic resonance study in solution and in the solid state of molybdenum dihydrobispyrazolylborates complexes
Afinidad, **64(528)**, 265-277, (2007)
339. M. A. Farrán, R. M. Claramunt, C. López, E. Pinilla, M. R. Torres y J. Elguero.
Structural characterization of alloxazine and substituted isoalloxazines: NMR and X-ray crystallography
Arkivoc, **iv**, 20-28 (2007)
340. M. Pérez-Torrallba, R. M. Claramunt, I. Alkorta y J. Elguero.
Double addition of azoles to glyoxal: characterization of the bis-adducts and theoretical study of their structure
Arkivoc, **xii**, 55-66 (2007)
341. J. Catalán, P. Pérez, R. M. Claramunt, M. D. Santa María y V. Bobosik.
On the molecular conformation of bisaromatic systems: the case of 2-phenyl-2*H*-benzotriazoles
Chem. Phys., **340**, 32-42 (2007)
342. C. López, R. M. Claramunt, M. A. García, E. Pinilla, M. R. Torres, I. Alkorta y J. Elguero.
Cocrystals of 3,5-dimethyl-1*H*-pyrazole and salicylic acid: controlled formation of trimers via O-H...N hydrogen bonds
Cryst. Growth. Des., **7**, 1176-1184 (2007)
343. M. D. Santa María, R. M. Claramunt, I. Alkorta y J. Elguero.
A theoretical and experimental study of the fluxional behaviour of molybdenum dihydrobis- and hydrotris- pyrazolylborates
Dalton Trans., 3995-3999 (2007)
344. A. Perona, D. Sanz, R. M. Claramunt, E. Pinilla, M. R. Torres y J. Elguero.
Acid assisted proton transfer in 4-[(4-*R*-phenylimino)methyl]pyridin-3-ols: NMR spectroscopy in solution and solid state, X-ray and UV studies and DFT calculations
J. Phys. Org. Chem., **20**, 610-623 (2007)

345. D. Sanz, R. M. Claramunt, A. Saini, V. Kumar, R. Aggarwal, S. P. Singh, I. Alkorta y J. Elguero. Pyrazolo[1,5-a]pyrimidines. A combined multinuclear magnetic resonance (^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^{19}F) and DFT approach to their structural assignment
Magn. Reson. Chem., **45**, 513-517 (2007)
346. Rosa María Claramunt, Dolores Santa María, Elena Pinilla, M. Rosario Torres and José Elguero. Structural Studies of Two Tinuvin® P Analogs: 2-(2,4-dimethyl-phenyl)-2H-benzotriazole and 2-Phenyl-2H-benzotriazole
Molecules, **12**, 2201-2214 (2007)
347. J. Teichert, P. Oulié, K. Jacob, L. Vendier, M. Etienne, R. M. Claramunt, C. López, C. Pérez-Medina, I. Alkorta y J. Elguero. The structure of fluorinated indazoles: the effect of the replacement of a H by a F atom on the supramolecular structure of NH-indazoles
New. J. Chem., **31**, 936-946 (2007)
348. B. R. Manzano, F. A. Jalón, G. Espino, A. Guerrero, R. M. Claramunt, C. Escolástico, J. Elguero y M. A. Heras. Synthesis, spectral characterization and cytotoxicity of Ru-bipyridyl complexes containing hexakis(pyrazol-1-yl)benzene (hpzb) as a co-ligand
Polyhedron, **26**, 4373-4382 (2007)
349. D. Sanz, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero. The use of chemical shifts vs. coupling constants for studying tautomerism: a combined experimental and theoretical approach
Struct. Chem., **18**, 703-708 (2007)
350. M. D. Santa María, R. M. Claramunt, M. A. García y J. Elguero. Synthesis, structure, and isomerism of N-2,4-dinitrophenylbenzotriazoles
Tetrahedron, **63**, 3737-3744 (2007)
351. S. Trofimenko, G. P. A. Yap, F. A. Jové, R. M. Claramunt, M. A. García, M. D. Santa María, I. Alkorta y J. Elguero. Structure and tautomerism of 4-bromo substituted 1H-pyrazoles
Tetrahedron, **63**, 8104-8111 (2007)
352. C. López, R. M. Claramunt and J. Elguero. Oxalic acid/phenols and oxalic acid/cholesterol co-crystals: a solid state ^{13}C CPMAS NMR study
Arkivoc, **iv**, 33-46 (2008)
353. A-Ch. Uldry, J. M. Griffin, J. R. Yates, M. Pérez-Torralba, M. D. Santa María, A. L. Webber, M. L. L. Beaumont, A. Samoson, R. M. Claramunt, Ch. J. Pickard y S. P. Brown. Quantifying weak hydrogen bonding in uracil and 4-cyano-4'-ethynylbiphenyl: a combined computational and experimental investigation of NMR chemical shifts in the solid state
J. Am. Chem. Soc. **130**, 945-954 (2008)
354. J. M. Lopez del Amo, U. Langer, G. Buntkowsky, H.-M. Vieth, M. Pérez-Torralba, D. Sanz, R. M. Claramunt, J. Elguero y H.-H. Limbach. NMR Studies of Ultrafast Intramolecular Proton Tautomerism in Crystalline and Amorphous N, N'-Diphenyl-6-aminofulvene-1-alimine: Solid State, Kinetic Isotope and Tunnel Effects
J. Am. Chem. Soc. **130**, 8620-8632 (2008)
355. M. D. Ribeiro da Silva, M. A. V. Ribeiro da Silva, V. L. S. Freitas, M. V. Roux, P. Jiménez, M. Temprado, J. Z. Dávalos, P. Cabildo, R. M. Claramunt y J. Elguero. Structural studies of cyclic ureas: 1. Enthalpies of formation of imidazolidin-2-one and N,N'-trimethylenurea
J. Chem. Thermodyn., **40**, 386-393 (2008)
356. M. D. Ribeiro da Silva, M. A. V. Ribeiro da Silva, V. L. S. Freitas, M. V. Roux, P. Jiménez, M. Temprado, J. Z. Dávalos, P. Cabildo, R. M. Claramunt y J. Elguero. Structural studies of cyclic ureas: 2. Enthalpy of formation of parabanic acid
J. Chem. Thermodyn., **40**, 1378-1385 (2008)

357. G. Ballano, A. I. Jiménez, C. Cativiela, R. M. Claramunt, D. Sanz, I. Alkorta y J. Elguero. Structure of N,N'-Bis(aminoacids) in the Solid state and in Solution. A ^{13}C and ^{15}N CPMAS NMR study *J. Org. Chem.*, 73, 8575-8578 (2008)
358. J. C. del Valle, R. M. Claramunt, J. Catalán
Fluorescence spectroscopy and amplified spontaneous emission (ASE) of phenylimidazoles: Predicted vibronic coupling along the excited-state intramolecular proton transfer in 2-(2'-hydroxyphenyl)imidazoles
J. Phys Chem. A, 112, 5555-5565 (2008)
359. M. A. García, R. M. Claramunt y J. Elguero.
 ^{13}C and ^{15}N NMR chemical shifts of 1-(2',4'-dinitrophenyl) and 1-(2',4',6'-trinitrophenyl)pyrazoles in the solid state and in solution
Magn. Reson. Chem., 46, 697-700 (2008)
360. A. Perona, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
NMR studies of novel Schiff bases derived from L- α -amino methyl esteres and 3-hydroxypyridin-4-carboxaldehyde
Magn. Reson. Chem., 46, 930-938 (2008)
361. D. Sanz, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero, W. R. Thiel y T. Rüffer.
A Theoretical and Experimental NMR study of the Tautomerism of two Phenylene-bis-C-Substituted Pyrazoles
New. J. Chem., 32, 2225-2232 (2008)
362. W. Holzer, R. M. Claramunt, C. López, I. Alkorta y J. Elguero
A study in desmotropy
Solid State NMR, 34, 68-76 (2008)
363. P. Cornago, R. M. Claramunt, L. Bouissane and J. Elguero.
A molecular balance to measure the strength of N-H $\cdots\pi$ hydrogen bonds based on the tautomeric equilibria of C-benzylphenyl substituted NH-pyrazoles
Tetrahedron, 64, 3667-3673 (2008)
364. P. Cornago, R. M. Claramunt, L. Bouissane, I. Alkorta and J. Elguero.
A study of the tautomerism of β -dicarbonyl compounds with special emphasis on curcuminoids
Tetrahedron, 64, 8089-8094 (2008)
365. C. Escolástico, M. Blanco, R. M. Claramunt, D. Sanz and J. Elguero.
Microwave Synthesis of Arylmethyl Substituted Pyrazoles
The Open Organic Chemistry Journal, 2, 10-16 (2008)
366. R. M. Claramunt, L. Bouissane, M. P. Cabildo, M. P. Cornago, J. Elguero, A. Radziwon and C. Medina
Synthesis and biological evaluation of curcuminoid pyrazoles as new therapeutic agents in inflammatory bowel disease: Effect on matrix metalloproteinases
Bioorg. Med. Chem., 17, 1290-1296 (2009)
367. R. M. Claramunt, C. López, C. Pérez-Medina, M. Pérez-Torralba, J. Elguero, G. Escames y D. Acuña-Castroviejo
Fluorinated indazoles as novel selective inhibitors of Nitric Oxide Synthase (NOS): synthesis and biological evaluation
Bioorg. Med. Chem., 17, 6180-6187 (2009)
368. J. Elguero, I. Alkorta, R. M. Claramunt, C. López, D. Sanz, D. Santa María
Theoretical calculations of a model of NOS indazole inhibitors: interaction of aromatic compounds with Zn-porphyrins
Bioorg. Med. Chem., 17, 8027-8031 (2009)
369. R. M. Claramunt, D. Sanz, C. López, E. Pinilla, M. R. Torres, J. Elguero, P. Nioche y C. S. Raman
The structures of indazolinone and 7-nitroindazolinone
Helv. Chim. Acta, 92, 1952-1962 (2009)

370. M. D. C. Ribeiro da Silva, M. A. V. Ribeiro da Silva, V. L. Freitas, M. V. Roux, P. Jiménez, M. Temprado, J. Z Dávalos, P. Cabildo, R. M. Claramunt, J. Elguero
Structural studies of cyclic ureas: 3. Enthalpy of formation of barbital
J. Chem. Thermodyn., **41**, 1400-1407 (2009)
371. C. Pérez-Medina, C. López, R. M. Claramunt, J. Elguero
Synthesis, reactivity and NMR spectroscopy of 4,6- and 6,7-difluoro-3-methyl-1H-indazoles
J. Heterocycl. Chem., **46**, 1408-1412 (2009)
372. M. D. Santa Maria, R. M. Claramunt, F. Herranz, I. Alkorta, J. Elguero
A theoretical and experimental NMR study of (+)-biotin methyl ester
J. Mol. Struct., **920**, 323-326 (2009)
373. R. Aggarwal, G. Sumran, R. M. Claramunt, D. Sanz, J. Elguero
Synthesis and structural characterization of pyrazol-1'-ylpyrazolo[1,5-a]pyrimidines by multinuclear spectroscopy
J. Mol. Struct., **934**, 96-102 (2009)
374. G. Accorsi, F. Barigelletti, A. Farrán, F. Herranz, R. M. Claramunt, M. Marcaccio, G. Valenti, F. Paolucci, E. Pinilla, M. R. Torres
Intramolecular Interactions and Photoinduced Electron Transfer in Isoalloxazine-Naphthalene Bichromophores
J. Photochem. Photobiol. A: Chem. **203**, 166-176 (2009)
375. M. A. Garcia, R. M. Claramunt, T. Solčan, V. Milata, I. Alkorta, J. Elguero
¹³C and ¹⁵N NMR spectra of aminobenzimidazoles in solution and in the solid state
Magn. Reson. Chem., **47**, 100-104 (2009).
376. D. Santa María, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero
The behaviour of Gliclazide in solution and in the solid state: a case of organic compound presenting a solid-solution structure
Magn. Reson. Chem., **47**, 472-477 (2009)
377. C. López, R. M. Claramunt, E. Pinilla, M. R. Torres, I. Alkorta, J. Elguero
Molecular complexes between π -excedent heterocycles (indoles and carbazole) and π -deficient polynitrobenzenes
Magn. Reson. Chem., **47**, 917-924 (2009)
378. P. Cornago, P. Cabildo, R. M. Claramunt, L. Bouissane, E. Pinilla, M. R. Torres y J. Elguero
The annular tautomerism of the curcuminoid NH-pyrazoles
New. J. Chem., **33**, 125-135 (2009)
379. D. Sanz, A. Perona, R. M. Claramunt, E. Pinilla, M. R. Torres, J. Elguero
Protonation effects on the chemical shifts of Schiff bases derived from 3-hydroxypyridin-4-carboxaldehyde
Arkivoc, **iii**, 102-113 (2010)
380. M. Pietrzak, J. P. Wehling, S. Kong, P. M. Tolstoy, I. G. Shenderovich, C. López, R. M. Claramunt, J. Elguero, G. S. Denisov y H.-H. Limbach
Symmetrization of Cationic Hydrogen Bridges of Protonated Sponges Induced by Solvent and Counteranion Interactions as Revealed by NMR Spectroscopy
Chem. Eur. J. **16**, 1679-1690 (2010)
381. M. Pérez-Torralba, C. López, C. Pérez-Medina, R. M. Claramunt, E. Pinilla, M. R. Torres, I. Alkorta, J. Elguero
Fast degenerate double proton transfer in the solid state between two indazolinone tautomers
CrystEngComm, **12**, 4052-4055 (2010)
382. C. Pérez Medina, C. López, R. M. Claramunt, J. Elguero
Trifluoro-3-hydroxy-1H-indazolecarboxylic Acids and Esters from Perfluorinated Benzenedicarboxylic Acids
Eur. J. Org. Chem., 890-899 (2010)

383. I. Alkorta, J. Elguero, R. M. Claramunt, C. López, D. Sanz
A theoretical multinuclear NMR study of pyrazolylborates
Heterocycl. Commun., **16**, 261-268 (2010)
384. M. A. García, P. Cabildo, R. M. Claramunt, E. Pinilla, M. R. Torres, I. Alkorta y J. Elguero
The interplay of hydrogen bonds and halogen bonds in the structure of NH-pyrazoles bearing C-aryl and C-halogen substituents
Inorg. Chim. Acta, **363**, 1332-1342 (2010)
385. M. D. C. Ribeiro da Silva, M. A. V. Ribeiro da Silva, V. L. Freitas, M. V. Roux, P. Jiménez, J. Z. Dávalos, P. Cabildo, R. M. Claramunt, E. Pinilla, M. R. Torres, J. Elguero
Energetic studies of urea derivatives: Standard molar enthalpy of formation of 3,4,4'-trichlorocarbanilide
J. Chem. Thermodyn., **42**, 536-544 (2010)
386. C. P. Frizzo, M. A. P. Martins, M. R. B. Marzari, P. T. Campos, R. M. Claramunt, M. A. García, D. Sanz, I. Alkorta, J. Elguero
Structural Studies of 2-Methyl-7-substituted Pyrazolo[1,5-a]pyrimidines
J. Heterocycl. Chem., **47**, 1259-1268 (2010)
387. R. M. Claramunt, M. Pérez-Torralba, D. Santa María, D. Sanz, B. Elena, I. Alkorta, J. Elguero
¹⁵N-¹⁵N spin-spin coupling constants through intermolecular hydrogen bonds in the solid state
J. Magn. Reson., **206**, 272-279 (2010)
388. G. P. A. Yap, R. M. Claramunt, C. López, M. A. García, C. Pérez-Medina, I. Alkorta, J. Elguero
The structures of chiral and racemate campho[2,3-c]pyrazole: a combined crystallographic, solid-state NMR and computational study
J. Mol Struct., **965**, 74-81 (2010)
389. D. Sanz, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero
The solid-state structure of primary fatty amines: True amines or ammonium amides?
J. Mol Struct., **969**, 106-110 (2010)
390. J. Z. Dávalos, M. D. C. Ribeiro da Silva, M. A. V. Ribeiro da Silva, V. L. Freitas, P. Jiménez, M. V. Roux, P. Cabildo, R. M. Claramunt, J. Elguero
Computational Thermochemistry of Six Ureas, Imidazolidin-2-one, *N,N'*-trimethyleneurea, Benzimidazolinone, Parabanic Acid, Barbitol (5,5'-Diethylbarbituric Acid), and 3,4,4'-Trichlorocarbanilide, with an Extension to Related compounds
J. Phys. Chem. A, **114**, 9237-9245 (2010)
391. A. L. Webber, L. Emsley, R. M. Claramunt, S. P. Brown
NMR Crystallography of Campho[2,3-c]pyrazole (Z'= 6): Combining High-Resolution ¹H-¹³C Solid-State MAS NMR Spectroscopy and GIPAW Chemical-Shift Calculations
J. Phys Chem. A, **114**, 10435-10442 (2010)
392. M. P. Coles, M. S. Khalaf, R. M. Claramunt, M. A. García, I. Alkorta y J. Elguero
Fast double proton transfer in crystals of 1,3,4,6,7,8-hexahydro-2H-pyrimido[1,2-a]pyrimidine (hppH): ¹³C and ¹⁵N CPMAS NMR study of (hppH)₂
J. Phys. Org. Chem., **23**, 526-535 (2010)
393. J. C. Iglesias, D. Santa María, R. M. Claramunt, J. Elguero
Molecular Recognition Studies on Naphthyridine Derivatives
Molecules, **15**, 1213-1222 (2010)
394. I. Alkorta, F. Blanco, J. Elguero, R. M. Claramunt
The azido-tetrazole and diazo-1,2,3-triazole tautomerism in six membered heteroaromatic rings and their relationships with aromaticity: azines and perimidine
Tetrahedron, **66**, 2863-2868 (2010)
395. C. López, R. M. Claramunt, M. P. Cabildo, C. Pérez-Medina, M. C. Torralba, M. R. Torres
SSNMR spectroscopy and X-ray crystallography of fluorinated indazolinones
Acta Cryst., **A67**, C816 (2011)

396. R. M. Claramunt, M. A. García, M. A. Farrán, C. I. Nieto, M. C. Torralba, M. R. Torres, I. Alkorta, J. Elguero
Polymorphism in 8-hydroxyquinolin-2(1H)-one by X-ray crystallography, solid state NMR and DFT calculations
Acta Cryst., **A67**, C816-817 (2011)
397. D. Santa-María, R. M. Claramunt, S. F. Vasilevsky, S. V. Klyatskaya, I. Alkorta, J. Elguero
High resolution NMR of free radicals: ¹³C magic angle spinning of two solid organic free radicals derived from 4,5-dihydro-1H-imidazol-3-oxide-1-oxyl and theoretical calculation of their NMR properties
Arkivoc., **iii**, 114-127 (2011)
398. R. M. Claramunt, C. López, A. López, C. Pérez-Medina, M. Pérez-Torralba, I. Alkorta, J. Elguero, G. Escames, D. Acuña-Castroviejo
Synthesis and biological evaluation of indazole derivatives
Eur. J. Med. Chem., **46**, 1439-1447 (2011)
399. A. Sola, R. A. Orenes, M. A. García, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero, A. Tárraga, P. Molina
An Unprecedented 1,3-Diaza[3]ferrocenophane Scaffold as Molecular Probe for Anions
Inorg. Chem., **50**, 4212-4220 (2011)
400. J. M. Planesas, R. M. Claramunt, J. I. Borrell, V. I. Perez-Nueno
Improving VEGFR-2 docking-based screening by pharmacophore post-filtering and similarity search post-processing
J. Chem. Inf. Model., **51**, 777-787 (2011)
401. P. Cabildo, R. M. Claramunt, C. López, M. Ángeles García, M. Pérez-Torralba, E. Pinilla, M. R. Torres, I. Alkorta, J. Elguero
Crystal and molecular structure of three biologically active nitroindazoles
J. Mol. Struct., **985**, 75-81 (2011)
402. D. Santa María, M. A. Farrán, M. A. García, E. Pinilla, M. R. Torres, J. Elguero, R. M. Claramunt
Synthetic Hosts for Molecular Recognition of Ureas
J. Org. Chem., **76**, 6780-6788 (2011)
403. M. J. Mayoral, P. Cornago, R. M. Claramunt, M. Cano
Pyridyl and pyridiniumyl β -diketonates as building blocks for palladium (II) and allyl-palladium(II) isomers. Multinuclear NMR structural elucidation and liquid crystal behaviour
New. J. Chem., **35**, 1020-1030 (2011)
404. D. Sanz, R. M. Claramunt, M. A. García, I. Alkorta, J. Elguero
A ¹³C and ¹⁵N experimental NMR and theoretical study of the structure of linear primary aliphatic amines and ammonium salts: from C1 to C18
Tetrahedron, **67**, 4633-4639 (2011)
405. R. Aggarwal, V. Kumar, A. Bansal, D. Sanz, R. M. Claramunt
Multi-component solvent-free *versus* stepwise solvent mediated reactions: regioespecific formation of 6-trifluoromethyl and 4-trifluoromethyl-1H-pyrazolo[3,4-b]pyridines
J. Fluorine Chem., **140**, 31-37 (2012)
406. C. I. Nieto, M. A. García, M. A. Farrán, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, M. R. Torres, I. Alkorta, J. Elguero
Two Polymorphs of 8-hydroxycarbostryl: X-ray crystallography, solid state NMR and DFT calculations
J. Mol. Struct., **1008**, 88-94 (2012)
407. P. López-Tarifa, G. Sánchez-Sanz, I. Alkorta, J. Elguero, D. Sanz, A. Perona, R. M. Claramunt
The tautomeric structures of 3(5),3'(5')-azopyrazole [(E)-1,2-di(1H-pyrazol-3(5)-yl)diazene]: The combined use of NMR and electronic spectroscopies with DFT calculations
J. Mol. Struct., **1015**, 138-146 (2012)
408. C. Pérez-Medina, C. López, M. P. Cabildo, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, M. R. Torres, I. Alkorta, J. Elguero

- The tautomerism of fluorinated indazolinones in the solid state
J. Mol. Struct., 1022, 139-146 (2012)
409. D. Sanz, R. M. Claramunt, I. Alkorta, G. Sánchez-Sanz, J. Elguero
The structure of Glibenclamide in the solid state
Magn. Reson. Chem., 50, 246-255 (2012)
410. J. J. López González, F. Partal Ureña, J. R. Avilés Moreno, I. Mata, E. Molins, R. M. Claramunt, C. López, I. Alkorta, J. Elguero
The chiral structure of 1H-indazoles in the solid state: a crystallographic vibrational circular dichroism and computational study
New. J. Chem., 36, 749-758 (2012)
411. I. Alkorta, J. Elguero, M. A. García, C. López, R. M. Claramunt, G. A. Andrade, G. P. A. Yap
A tris(pyrazol-1-yl)methane bearing carboxylic acid groups at position 4: {1-[bis(4-carboxy-3,5-dimethyl-1H-pyrazol-1-yl)methyl]-3,5-dimethyl-1H-pyrazole-4-carboxylato} sodium dihydrate
Acta Cryst., C69, 972-976 (2013)
412. M. Pérez-Torralba, R. M. Claramunt, M. A. García, C. López, M. C. Torralba, M. R. Torres, I. Alkorta, J. Elguero
Structure of 1,5-benzodiazepinones in the solid state and in solution: Effect of the fluorination in the six-membered rings
Beilstein J. Org. Chem., 9, 2156-2167 (2013)
413. R. M. Tejedor, S. Uriel, S. Graus, T. Sierra, J. L. Serrano, R. M. Claramunt, C. López, M. Pérez-Torralba, I. Alkorta, J. Elguero
A Facile Method to Determine the Absolute Structure of Achiral Molecules Supramolecular-Tilt Structures
Chem. Eur. J., 19, 6044-6051 (2013)
414. J. Elguero, I. Alkorta, R. M. Claramunt, P. Cabildo, P. Cornago, M. Ángeles Farrán, M. Ángeles García, C. López, M. Pérez-Torralba, D. Santa María, D. Sanz
The structure of NH-benzazoles (1H-benzimidazoles, 1H- and 2H-indazoles, 1H- and 2H-benzotriazoles)
Chem. Heterocycl. Comp., 49, 191-218 (2013)
415. J. R. Avilés Moreno, M. M. Quesada Moreno, J. J. López González, R. M. Claramunt, C. López, I. Alkorta, J. Elguero
Self-assembly structures of 1H-indazoles in solution and solid phases: A vibrational (IR, FarIR, Raman and VCD) and computational study
ChemPhysPhysChem., 14, 3355-3360 (2013)
416. R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero
A theoretical study of the conformation and dynamic properties of 1,5-benzodiazepines and their derivatives
Comput. Theor. Chem., 1019, 108-115 (2013)
417. D. Sanz, R. M. Claramunt, F. Mathey, I. Alkorta, G. Sánchez-Sanz, J. Elguero
Intermolecular spin-spin coupling constants between ³¹P atoms
C. R. Chimie, 16, 937-944 (2013)
418. P. Cornago, P. Cabildo, D. Sanz, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, M. R. Torres, J. Elguero
Structure in the Solid State and in Solution of Hemi-curcuminoids
Eur. J. Org. Chem., 6043-6054 (2013)
419. J. Pinto, V. L. M. Silva, A. M. S. Silva, R. M. Claramunt, D. Sanz, M. C. Torralba, M. R. Torres, F. Reviriego, I. Alkorta, J. Elguero
The structure of azines derived from C-formyl-1H-imidazoles in solution and in the solid state: tautomerism, configurational and conformational studies
Magn. Reson. Chem., 51, 203-221 (2013)
420. M. S. Silva, V. L. M. Silva, R. M. Claramunt, D. Santa María, M. Ferraro, F. Reviriego, I. Alkorta, J. Elguero

- The structures of two aldazines: [1,1'-(1E,1'E)-hydrazine-1,2-diylidenebis(methan-1-yl-1-ylidene)dinaphthalen-2-ol](Lumogen) and 2,2'-(1E,1'E)-hydrazine-1,2-diylidenebis(methan-1-yl-1-ylidene)diphenol (salicylaldazine) in the solid state and in solution
Magn. Reson. Chem., **51**, 530-540 (2013)
421. J. Z. Dávalos, J. González, A. Guerrero, A. C. Valderrama-Negrón, L. D. Aguirre Mendez, R. M. Claramunt, D. Santa María, I. Alkorta, J. Elguero
Silver complex of chloroquine: synthesis, characterization and structural properties
New J. Chem. **37**, 1391-1401 (2013)
422. A. Farrán, J. Mohanraj, G. J. Clarkson, R. M. Claramunt, F. Herranz, G. Accorsi
Tuning Photoinduced Processes of Covalently Bound Isoalloxazine and Anthraquinone Bichromophores
Photochem. Photobiol. Sci. **12**, 813-822 (2013)
423. M. Bella, V. Milata, C. López, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero
Theoretical and Experimental NMR study of a Series of Five Nitrobenzene-1,2-diamines
Spectrosc. Lett., **46**, 91-99 (2013)
424. D. Santa María, R. M. Claramunt, V. Bobosik, M. C. Torralba, M. R. Torres, I. Alkorta, J. Elguero
Synthesis and structural study of 2-arylbenzotriazoles related to Tinuvins
Tetrahedron, **69**, 3027-3038 (2013)
425. C. P. Frizzo, M. A. Villetti, A. Z. Tier, I. M. Gindri, L. Buriol, F. A. Rosa, R. M. Claramunt, D. Sanz, M. A. P. Martins
Structural and Thermodynamic Properties of New Pyrazolo[3,4-d]pyridazinones
Thermochimica Acta, **574**, 63-72 (2013).
426. L. Infantes, M. A. García, C. López, R. M. Claramunt, J. Elguero
The Structure and Dynamic Properties of 1H-Pyrazole-4-carboxylic acids in the Solid State
Z. Phys. Chem., **227**, 841-856 (2013)
427. R. M. Claramunt, M. Pérez-Torralba, M. A. García, C. López, M. C. Torralba, M. R. Torres, I. Alkorta, J. Elguero
Intermolecular Hydrogen and Halogen Bonds in Fluorinated Benzimidazoles
Acta Cryst. (2014), A70, C643
428. R. M. Claramunt, C. López, D. Sanz, J. Elguero
Mechano Heterocyclic Chemistry: Grinding and Ball Mills
Adv. Heterocycl. Chem. **112**, 117-143 (2014)
429. C. I. Nieto, P. Cabildo, M. A. García, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero
An experimental and theoretical NMR study of NH-benzimidazoles in solution and in the solid state: proton transfer and tautomerism
Beilstein J. Org. Chem. **10**, 1620-1629 (2014)
430. M. Pérez-Torralba, M. A. García, C. López, M. C. Torralba, M. R. Torres, R. M. Claramunt, J. Elguero
Structural Investigation of Weak Intermolecular Interactions (Hydrogen and Halogen Bonds) in Fluorine-Substituted Benzimidazoles
Cryst. Growth Des. **14**, 3499-3509 (2014)
431. A. Virgili, M. M. Quesada Moreno, J. R. Avilés Morenob), J. J. López González, M. A. García, R. M. Claramunt, M. R. Torres, M. L. a Jimeno, F. Reviriego, I. Alkorta, J. Elguero
A Spectroscopic Study of Colchicine in the Solid State and in Solution by Multinuclear Magnetic Resonance and Vibrational Circular Dichroism
Helv. Chim. Acta, **97**, 471-490 (2014)
432. R. Aggarwal, V. Kumar, D. Sanz, R. M. Claramunt
Effect of substituents on the regioselectivity of the reaction of α -tosyloxyketones with thioureas in acidic medium: Access to 2-aminothiazoles and 2-imino-2,3-dihydrothiazoles
J. Heterocycl. Chem., **51**, 598-603 (2014)
433. I. Alkorta, R. M. Claramunt, J. Elguero, M. B. Ferraro, J. C. Facelli, P. F. Provasi, F. Reviriego

- The Origin of the Splitting of ^{13}C and ^{15}N NMR Signals of 3(5)-Phenyl-5(3)-Methylpyrazolium Chloride and Bromide In the Solid State: Quantum Espresso Calculations.
J. Mol. Struct. **1075**, 551-558 (2014).
434. L. Soria, P. Ovejero, M. Cano, J. V. Heras Castelló, M. R. Torres, R. M. Claramunt, P. Cornago
Coordination behaviour of new dipyridylpyrazole ligands towards ZnCl_2 and PdCl_2 fragments.
Crystalline structural characterization and multinuclear NMR studies as an evidence of linkage and conformational isomers.
RSC Adv., **4**, 9383 – 9394 (2014)
435. M. M. Quesada Moreno, J. R. Avilés Moreno, J. J. López González, R. M. Claramunt, C. López, I. Alkorta, J. Elguero
Chiral self-assembly of optically pure (4*S*,7*R*)-campho[2,3-*c*]pyrazole in the solid state: a vibrational circular dichroism (VCD) and computational study
Tetrahedron: Asymmetry, **25**, 507–515 (2014)
436. D. Sanz, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero
A theoretical and experimental NMR study of the prototropic tautomerism of tris(tetrabutylammonium) hydrogen pyrophosphate salt in solution and in the solid state
Afinidad, **72**, 14-20 (2015)
437. J. González-Albadalejo, D. Sanz, R. M. Claramunt, J. L. Lavandera, I. Alkorta, J. Elguero
Curcumin and curcuminoids: chemistry, structural studies and biological properties
An. Real. Acad. Farm. **81**, 278-310 (2015).
438. R. Aggarwal, V. Kumar, G. Singh, D. Sanz, R. M. Claramunt, I. Alkorta, G. Sánchez-Sanz, J. Elguero
An NMR and Computational Study of Azolo[a]pyrimidines with Special Emphasis on Pyrazolo[1,5-*a*]pyrimidines
J. Heterocycl. Chem., **52**, 336-345 (2015)
439. M. A. Farrán, D. Santa María, M. A. García, R. M. Claramunt, G. J. Clarkson
New macrocyclic compounds with naphthyridine units for molecular recognition studies of biotin and urea derivatives
J. Incl. Phenom. Macrocycl. Chem., **81**, 57-69 (2015)
440. C. I. Nieto, M. P. Cabildo, M. P. Cornago, D. Sanz, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero, J. A. García, A. López, D. Acuña-Castroviejo
Synthesis, structure and biological activity of 3(5)-trifluoromethyl-1*H*-pyrazoles derived from hemicurcuminoids
J. Mol. Struct., **1100**, 518-529 (2015)
441. I. Alkorta, J. Elguero, M. Pérez-Torralba, C. López, R. M. Claramunt
A theoretical and experimental study of the NMR spectra of 4,5,6,7-tetrafluorobenzazoles with special stress on PCM calculations of chemical shifts
Magn. Reson. Chem., **53**, 353-362 (2015)
442. D. Sanz, C. I. Nieto, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero
A multinuclear magnetic resonance study of fluoro derivatives of hydroxybenzaldehydes
Magn. Reson. Chem., **15**, 624-631 (2015)
443. M. A. García, M. A. Farrán, D. Santa María, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, M. R. Torres, C. Jaime, J. Elguero
Pyrrole-pyridine and pyrrole-naphthyridine hosts for anion recognition
Molecules, **20**, 9862-9878 (2015)
444. C. I. Nieto, M. P. Cabildo, M. P. Cornago, D. Sanz, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, M. R. Torres, J. Elguero, J. A. García, A. López, D. Acuña-Castroviejo
Fluorination effects on NOS inhibitory activity of pyrazoles related to curcumin
Molecules, **20**, 15643-15665 (2015)
445. M. Sardo, S. M. Santos, A. A. Babaryk, C. López, I. Alkorta, J. Elguero, R. M. Claramunt, L. Mafra
Diazole-based powdered cocrystal featuring a helical hydrogen-bonded network: Structure determination from PXRD, solid-state NMR and computer modeling

- Solid State Nuclear Mag. Res.*, **65**, 49-63 (2015)
446. P. Cabildo, R. M. Claramunt, Fco. Javier Zuñiga, I. Alkorta, J. Elguero
Crystal and molecular structures of two 1H-2-substituted benzimidazoles
Z. Kristallogr., **230**, 427-438 (2015)
447. L. Infantes, R. M. Claramunt, D. Sanz, I. Alkorta, J. Elguero
The structure of two scorpionates: thallium tetrakis(3-phenyl-1H-pyrazol-1-yl)borate and potassium tetrakis(3-cyclopropyl-1H-pyrazol-1-yl)borate
Acta Cryst. **C72**, 819-825 (2016)
448. R. M. Claramunt, C. I. Nieto, D. Sanz, J. Elguero
Curcumin derived pyrazoles and related compounds
Afinidad **74**, 259-268 (2016)
449. R. Martí-Centelles, E. Falomir, M. Carda, C. I. Nieto, M. P. Cornago, R. M. Claramunt
Effects of Curcuminoid Pyrazoles on Cancer Cells and on the Expression of Telomerase Related Genes
Arch. Pharm. Chem. Life Sci. **349**, 532-538 (2016)
450. O. Martín, M. Pérez-Torralba, M. Á. García, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, M. R. Torres, I. Alkorta, J. Elguero
Static and Dynamic Properties of Fluorinated 4-Aryl-1,5-Benzodiazepinones
ChemistrySelect. **4**, 861-870 (2016)
451. D. Santa María, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero, Fco. J. Zúñiga
The structure of 4,5,6,7-tetrafluoro-1H-benzotriazole in the solid state and in solution
J. Fluorine Chem. **92**, 98-104 (2016)
452. D. Santa María, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, M. R. Torres, I. Alkorta, J. Elguero
The structure and properties of 5,6-dinitro-1H-benzotriazole
J. Mol. Struct. **1113**, 153-161 (2016)
453. R. Schwamm, R. Vianello, A. Marsavelski, M. A. García, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Saame, Ch. Fitchett, A. Edwards, M. Coles
¹⁵N NMR Spectroscopy, X-ray and Neutron Diffraction, Quantum-Chemical Calculations, and UV/vis-Spectrophotometric Titrations as Complementary Techniques for the Analysis of Pyridine-Supported Bicyclic Guanidine Superbases
J. Org. Chem. **81**, 7612-7625 (2016)
454. M. A. Farrán, A. Listorti, V. Roiati, G. Accorsi, G. Gigli, G. J. Clarkson, R. M. Claramunt
Photoinduced processes in covalently bound isoalloxazine-anthracene macrocycles
J. Photochem. Photobiol. A, **314**, 189-197 (2016)
455. M. L. Jimeno, M. T. Benito, E. García Doyagüez, R. M. Claramunt, D. Sanz, M. Marín-Luna, I. Alkorta, J. Elguero
A theoretical and experimental NMR study of BODIPY 493/503: difluoro{2-[1-(3,5-dimethyl-2 H -pyrrol-2-ylidene- N)ethyl]-3,5-dimethyl-1 H -pyrrolato- N }boron
Magn. Reson. Chem. **54**, 684-688 (2016)
456. C. I. Nieto, P. Cabildo, R. M. Claramunt, P. Cornago, D. Sanz, M. C. Torralba, M. R. Torres, M. B. Ferraro, I. Alkorta, M. Marín-Luna, J. Elguero
The structure of β -diketones related to curcumin determined by X-ray crystallography, NMR (solution and solid state) and theoretical calculations
Struct. Chem. **27**, 705-730 (2016)
457. R. Aggarwal, G. Singh, D. Sanz, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, M. R. Torres
NBS mediated one-pot regioselective synthesis of 2,3-disubstituted imidazo[1,2-a]pyridines and their unambiguous characterization through 2D NMR and X-ray crystallography
Tetrahedron **72**, 3832-3838 (2016)
458. C. I. Nieto, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, M. R. Torres, J. Elguero
Crystal structure of (1Z,4Z)-2,4-dimethyl-3Hbenzo[b][1,4]diazepine
Acta Cryst. **E73**, 647-650 (2017) Q4

459. C. I. Nieto, A. Andrade, D. Sanz, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, M. R. Torres, I. Alkorta, J. Elguero
Curcumin Related 1,4-Diazepines: Regioselective Synthesis, Structure Analysis, Tautomerism, NMR
Spectroscopy, X-ray Crystallography, Density Functional Theory and GIAO Calculations
ChemistrySelect **2**, 3732 – 3738 (2017) Q4
460. I. Alkorta, R. M. Claramunt, E. Díez-Barra, J. Elguero, A. de la Hoz, C. López
The organic chemistry of poly(1H-pyrazol-1-yl)methanes
Coord. Chem. Rev. **339**, 153-182 (2017) Q1
461. M. M. Quesada-Moreno, A. J. Cruz-Cabeza, J. R. Avilés-Moreno, P. Cabildo, R. M. Claramunt, I.
Alkorta, J. Elguero, F. J. Zuñiga, J. J. López-González
The Curious Case of 2-Propyl-1H-Benzimidazole in the Solid State: An Experimental and
Theoretical Study
J. Phys. Chem. A **121**, 5665-5674 (2017) Q2
462. J. Catalán, M. A. García, R. M. Claramunt
Influence of solvent basicity on DMABN photophysics
J. Phys. Org. Chem. **30**(3), e3613-e3621 (2017) Q3
463. D. García-Pérez, C. López, R. M. Claramunt, Ibon Alkorta, J. Elguero
¹⁹F-NMR Diastereotopic Signals in Two N-CHF₂ Derivatives of (4S,7R)-7,8,8-Trimethyl-4,5,6,7-
tetrahydro-4,7-methano-2H-indazole
Molecules **22**, 2003-2015 (2017) Q2
464. M. M. Quesada-Moreno, J. R. Avilés-Moreno, J. J. López-González, K. Jacob, L. Vendier, M. Etienne,
I. Alkorta, J. Elguero, R. M. Claramunt
Supramolecular organization of perfluorinated 1H-indazoles in the solid state using X-ray
crystallography, SSNMR and sensitive (VCD) and non sensitive (MIR, FIR and Raman) to chirality
vibrational spectroscopies
Phys. Chem. Chem. Phys. **19**, 1632-1643 (2017) Q1
465. N. de la Pinta, A. J. Cruz-Cabeza, T. Brezowski, X. M. Aretxabaleta, F. J. Zúñiga, M. M. Quesada-
Moreno, J. R. Avilés-Moreno, J. J. López-González, R. M. Claramunt, J. Elguero
Polymorphism in 2-propyl-1H-benzimidazole
Acta Cryst. A **74**, e340 (2018) Q1
466. M. A. Farrán, M. A. Bonet, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, I. Alkorta, J. Elguero
The structures of 1,4-Diaryl-5-trifluoromethyl-1H-1,2,3-triazoles Related to J147 a Drug for Treating
Alzheimer's Disease
Acta Cryst. C **74**, 2053-2296 (2018). Q1
467. M. M. Quesada-Moreno, A. Virgili, E. Monteagudo, R. M. Claramunt, J. R. Avilés Moreno, J. J. López
González, I. Alkorta, J. Elguero
Vibrational circular dichroism (VCD) methodology for the measurement of enantiomeric excess in chiral
compounds in solid phase and for the complementary use of NMR and VCD techniques in solution: the
camphor case
Analyst **143**, 1406-1416 (2018) Q1
468. G. Valenti, M. Iurlo, R. M. Claramunt, G. Accorsi, F. Paolucci, A. Farrán, M. Marcaccio
Redox Properties and Interchromophoric Electronic Interactions in Isoalloxazine-Anthraquinone Dyads
ChemElectroChem **5**, 985-990 (2018) Q1
469. D. Sanz, R. M. Claramunt, Ch. Roussel, I. Alkorta, J. Elguero
The structure of N-benzylazoles from pyrrole to carbazole: geometries and energies
Indian J. Heterocycl. Chem. **28**, 1-10 (2018)
470. L. Infantes, J. M. Moreno, R. M. Claramunt, D. Sanz, I. Alkorta, J. Elguero
The structure of four thallium tris(1H-pyrazol-1-yl)hydroborates in the solid state by
X-ray crystallography and in solution by NMR and DFT-GIAO calculations
Inorg. Chim. Acta **483**, 402-410 (2018)

471. Fco. J. Zuñiga, A. J. Cruz-Cabeza, X. M. Aretxabaleta, N. dela Pinta, T. Breczewski, M. M. Quesada-Moreno, J. R. Avilés-Moreno, J. J. López-González, R. M. Claramunt, J. Elguero
Conformational aspects of polymorphs and phases of 2-propyl-1H-benzimidazole
IUCrJ, 5, 706-715 (2018) Q1
472. R. M. Claramunt, D. Santa María, I. Alkorta, J. Elguero
The Structure of N-phenyl-pyrazoles and Indazoles: Mononitro, Dinitro, and Trinitro Derivatives
J. Heterocyclic. Chem. 55, 44-64 (2018) Q3
473. C. I. Nieto, D. Sanz, Rosa M. Claramunt, M. C. Torralba, M. R. Torres, I. Alkorta, J. Elguero
Molecular structure in the solid state by X-ray crystallography and SSNMR and in solution by NMR of two 1,4-diazepines
J. Mol. Struct. 1155, 205-214 (2018) Q3
474. G. Sumran, R. Aggarwal, M. Hooda, D. Sanz, R. M. Claramunt
Unusual Synthesis of Azines and Their Oxidative Degradation to Carboxylic Acid Using Iodobenzene Diacetate
Synt. Commun. 48, 439-446 (2018) Q3
475. C. I. Nieto, P. Cabildo, M. A. García, R. M. Claramunt, J. Elguero, I. Alkorta
Libration of phenyl groups detected by VT-SSNMR: comparison with X-ray crystallography
Magn. Reson. Chem. 56, 1083-1088 (2018)
476. C. I. Nieto, M. P. Cornago, M. P. Cabildo, D. Sanz, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, M. R. Torres, D. Martínez Casanova, Y. R. Sánchez-Alegre, E. Escudero, J. L. Lavandera
Evaluation of the Antioxidant and Neuroprotectant Activities of New Asymmetrical 1,3-diketones
Molecules 23, 1837-1863 (2018) Special Issue on Neuroprotective Agents
477. M. Pérez Torralba, D. Sanz, R. M. Claramunt, I. Alkorta, Ch. Dardonville, J. Elguero
The Structure of Fosfomycin Salts in Solution and in the Solid State by Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy and DFT Calculations
Tetrahedron 74, 3937-3942 (2018)
478. G. J. Clarkson, M. Á. Farrán, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero
The structure of an anti-aging agent used for treating Alzheimer's disease, J147 [(E)-N-(3-methoxybenzylidene)-N'-(2,4-dimethylphenyl)-N'-(2,2,2-trifluoroaceto)hydrazide], at 150 K
Acta Cryst C 75, 271-276 (2019).
479. C. I. Nieto, M. P. Cornago, M. P. Cabildo, D. Sanz, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, J. Elguero
Synthesis, structure and NMR study of fluorinated isoxazoles derived from hemi-curcuminoids
J. Fluorine Chem. 219, 39-49 (2019)
480. M. Marín-Luna, R. M. Claramunt, C. I. Nieto, I. Alkorta, I. Alkorta, F. Reviriego
A theoretical NMR study of polymorphism in crystal structures of azoles and benzazoles
Magn. Reson. Chem. 57, 275-284 (2019)
481. D. Santa María, R. M. Claramunt, J. Elguero, M. Carda, E. Falomir, C. Martín-Beltrán
New N,C-Diaryl-1,2,4-triazol-3-ones. Synthesis and Evaluation as Anticancer Agents
Med. Chem. 15, 360-372 (2019)
482. V. L. M. Silva, A. M. S. Silva, R. M. Claramunt, D. Sanz, L. Infantes, Á. Martínez López, F. Reviriego, I. Alkorta, J. Elguero
An example of polynomial expansion: the reaction of 3(5)-methyl-1H-pyrazole with chloroform and characterization of the four isomers
Molecules 24, 568-573 (2019)
483. M. M. Quesada-Moreno, J. R. Avilés Moreno, J. J. López González, J. Zúñiga, D. Santa María, R. M. Claramunt, F. Reviriego, I. Alkorta, J. Elguero
The synergy of different solid-state techniques to elucidate the supramolecular assembly of two 1H-benzotriazole polymorphs
Phys. Chem. Chem. Phys. 21, 19879-19889 (2019)
484. W. Holzer, L. Castoldi, V. Kyselova, D. Sanz, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, I. Alkorta, J. Elguero

- Multinuclear NMR spectra and GIAO/DFT calculations of N-benzylazoles and N-benzylbenzazoles
Struct. Chem. **30**, 1729-1735 (2019)
485. V. Silva, A. Silva, R. M. Claramunt, C. López, D. Sanz, L. Infantes, A. Martínez López, F. Reviriego, I. Alkorta, J. Elguero
New Tetrakis(1*H*-pyrazol-1-yl)methanes
Tetrahedron **75**, 130690-130699 (2019)
486. R. Aggarwal, S. Sharma, M. Hooda, D. Sanz, R. M. Claramunt, B. Twanley, I. Rozas
Visible-light mediated regioselective approach towards synthesis of 7-aryl-6-methyl-[1,2,4]triazolo[3,4-*b*][1,3,4]thiadiazines
Tetrahedron, **75**, 130728- 130736 (2019)
487. D. Santa María, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, M. R. Torres, J. Elguero
Synthesis of a new 24-membered tetramide macrocycle and X-ray crystal structure determination
Tetrahedron Lett. **60**, 1206–1209 (2019)
488. D. Núñez Alonso, M. Pérez-Torralba, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, P. Delgado-Martínez, I. Alkorta, J. Elguero, Ch. Roussel
Regiospecific Synthesis and Structural Studies of 3,5-Dihydro-4*H*-pyrido[2,3-*b*][1,4]diazepin-4-ones and Comparison with 1,3-Dihydro-2*H*-benzo[*b*][1,4]diazepin-2-ones
ACS Omega **5**, 25408–25422 (2020)
489. M. Marín-Luna, R. M. Claramunt, J. Elguero, I. Alkorta
Theoretical and Spectroscopic Characterization of API-Related Azoles in Solution and in Solid State
Curr. Pharm. Des. **26**, 4847 - 4857 (2020)
490. A. L. Webber, J. R. Yates, M. Zilka, S. Sturniolo, A. C. Uldry, E. K. Corlett, C. J. Pickard, M. Pérez-Torralba, M. A. Garcia, D. Santa Maria, R. M. Claramunt, S. P. Brown
Weak Intermolecular CH···N Hydrogen Bonding: Determination of ¹³CH–¹⁵N Hydrogen-Bond Mediated *J* Couplings by Solid-State NMR Spectroscopy and First-Principles Calculations
J. Phys. Chem. A **124**, 560-572 (2020)
491. I. Alkorta, J. Elguero, Ch. Dardonville, F. Reviriego, D. Santa María, R. M. Claramunt, M. Marín-Luna
A theoretical and spectroscopic (NMR and IR) study of indirubin in solution and in the solid state
J. Phys. Org. Chem. **33**, e4043-4053(2020)
492. M. Marín-Luna, P. Sánchez-Andrada, I. Alkorta, J. Elguero, M. C. Torralba, P. Delgado, D. Santa María, R. M. Claramunt
A structural analysis of 2,5-diaryl-4*H*-2,4-dihydro-3*H*-1,2,4-triazol-3-ones: NMR in the solid-state, Xray crystallography and GIPAW calculations
Magn. Reson. Chem. **59**, 423-438 (2020)
493. A.F. Pozharskii, A. V. Gulevskaya, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero
Perimidines: a unique π-amphoteric heteroaromatic system
Russ. Chem. Rev. **89**, 1204-1260 (2020)
494. M. Marín-Luna, R. M. Claramunt, C. López, M. Pérez-Torralba, D. Sanz, F. Reviriego, I. Alkorta, J. Elguero
A GIPAW versus GIAO-ZORA-SO study of ¹³C and ¹⁵N CPMAS NMR chemical shifts of aromatic and heterocyclic bromo derivatives
Solid State Nucl. Magn. Reson. **108**, 101676-101683 (2020)
495. A.de la Hoz, R. M. Claramunt, J. Elguero, I. Alkorta
3-Pyrazolines (2,3-dihydro-1*H*-pyrazoles): synthesis, reactivity, and physical and biological properties
Arkivoc **IX**, 75-129 (2021)
496. P. Sánchez-Andrada, M. Marín-Luna, I. Alkorta, J. Elguero, G. Percho, D. Santa María, R. M. Claramunt
Conformational analysis of 2,5-diaryl-4-methyl-2,4-dihydro-3*H*-1,2,4-triazol-3-ones: Multinuclear NMR and DFT calculations
J. Heterocyclic Chem. **58**, 1130–1140 (2021)

497. R. Aggarwal, M. Hooda, N. Jain, D. Sanz, R. M. Claramunt, B. Twamley, I. Rozas.
An efficient, one-pot, regioselective synthesis of 2-aryl/hetaryl-4-methyl-5-acylthiazoles under solvent-free conditions
J. Sulphur Chem. <https://doi.org/10.1080/17415993.2021.1975119> (2021)
498. G. Accorsi, A.-L. Capodilupo, R. M. Claramunt, G. J. Clarkson, M.A. Farrán, F. G. Gatti, S. León, S. Venturi.
Studies of novel trifluoroacetylated diaryl hydrazone molecular photoswitches in solution and in the solid state
New J. Chem. **45**, 12471-12478 (2021)
499. I. Alkorta, R. M. Claramunt, D. Sanz, J. Elguero, W. Holzer
A ^{13}C chemical shifts study of iodopyrazoles: experimental results and relativistic and non-relativistic calculations
Struct. Chem. **32**, 925–937 (2021)
500. A. Ortíz de Zárate, M. Pérez-Torralba, C. López, R. M. Claramunt, D. Martínez-Casanova, I. Sánchez-Vera, J. L. Lavandera
1,5-Benzodiazepin-2(3H)-ones: In Vitro Evaluation as Antiparkinsonian Agents
Antioxidants **10**, 1584- (2021)

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

Título del contrato/proyecto: Estudio de tautomería y polimorfismo en fármacos
Entidades participantes: Esteve Química S. A./Dpto. Química Orgánica y Biología, UNED
Duración, desde: 08/03/2002 hasta: 08/09/2002
7.933,47 Euros
Investigadora responsable: R. M. Claramunt Vallespí

CONVENIO DE COLABORACIÓN TECNOLÓGICA EN RMN. Asesoramiento, análisis, realización y puesta a punto de experimentos. Conferencias. Demostraciones
Entidades participantes: Bruker Española S. A. y Dpto. Química Orgánica y Biología, UNED
Duración, desde: 20/01/2003 hasta: 20/01/2005
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Título del contrato/proyecto: Estudio por RMN en disolución y en estado sólido de ciproheptadina, fosfato de piridoxal, dihexacina y mezclas relacionadas
Entidades participantes: Bruker Española S. A. y Dpto. Química Orgánica y Biología, UNED
Duración, desde: 07/06/2004 hasta: 06/12/2004
6.693,55 Euros
Investigadora responsable: R. M. Claramunt Vallespí

Título del contrato/proyecto: Estudio por RMN en disolución y en estado sólido dihexazinas, cutinas de tomate, zeolitas, fullerenos, materiales sólidos y muestras relacionadas.
Entidades participantes: Bruker Española S. A. y Dpto. Química Orgánica y Biología de la UNED
Duración, desde: 07/06/2004 hasta: 06/12/2004
37.120,0 Euros
Investigadora responsable: R. M. Claramunt Vallespí

CONVENIO DE COLABORACIÓN TECNOLÓGICA EN RMN. Asesoramiento, análisis, realización y puesta a punto de experimentos. Conferencias. Demostraciones

Entidades participantes: Bruker Española S. A. y Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica de la UNED
Duración, desde: 10/03/2005 hasta: 09/03/2007
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

CONVENIO DE COLABORACIÓN TECNOLÓGICA EN RMN. Colaboración científica y tecnológica en RMN
Entidades participantes: Bruker Española S. A. y Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica de la UNED
Duración, desde: 10/03/2007 hasta: 09/03/2009
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

Título del contrato/proyecto: Estudios por Resonancia Magnética Nuclear (RMN) de polimorfismo y quiralidad en moléculas orgánicas y bio-orgánicas.

Entidades participantes: Bruker Española S. A. y Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica de la UNED
Duración, desde: 25/07/2007 hasta: 31/01/2008
20.970,0 Euros
Investigadora Responsable: R. M. Claramunt Vallespí

CONVENIO DE COLABORACIÓN TECNOLÓGICA EN RMN. Colaboración científica y tecnológica en RMN
Entidades participantes: Bruker Española S. A./ Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica, UNED

Duración, desde: 1/07/2009 hasta: 30/06/2011
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

CONVENIO DE COOPERACIÓN EDUCATIVA

Entidades participantes: Depto Química Orgánica del Instituto Químico de Sarriá (IQS)-Universitat Ramon Llull./
Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica, Facultad de Ciencias, UNED

Duración, desde: 2/02/2009 hasta: 01/02/2010
Responsables: José Ignacio Borrell (IQS), R. M. Claramunt Vallespí (UNED)

CONVENIO DE COLABORACIÓN TECNOLÓGICA EN RMN.

Entidades participantes: Bruker Española S. A./ Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica, UNED

Duración, desde: 27/09/2011 hasta: 26/09/2013
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

CONTRATO DE COLABORACIÓN CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA EN RMN.

Entidades participantes: Bruker Española S. A./ Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica, UNED

Duración, desde: 24/10/2013 hasta: 23/10/2015
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

CONTRATO DE COLABORACIÓN CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA EN RMN.

Entidades participantes: Bruker Española S. A./ Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica, UNED

Duración, desde: 01/12/2015 hasta: 30/11/2017
Investigadora Principal: R. M. Claramunt Vallespí

CONTRATO DE COLABORACIÓN CIENTÍFICA Y TECNOLÓGICA EN RMN.

Entidades participantes: Bruker Española S. A./ Dpto. Química Orgánica y Bio-Orgánica, UNED

Duración, desde: 01/03/2018 hasta: 28/02/2020
Investigadora Principal: D. Sanz del Castillo

GLAXOSMITHKLINE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO, S. L. (GSK)

Acuerdo de transferencia de material químico entre la UNED y la entidad GSK. Inicio: 17 de octubre de 2012. Acuerdo vigente

GSK está interesada en el estudio de una nueva diversidad química como potenciales agentes terapéuticos.

Patentes y Modelos de utilidad

R. M. Claramunt, A. Martínez-Fernández y E. Quintanilla.

"Nuevos procedimientos de síntesis de 1,1-metilendipirazoles"

Patentes Españolas

N^{OS} de Registro 550.483 (1985)

550.484 (1985)

550.485 (1985)

CENTRUM PHARMACEUTICAL INTERNACIONAL

España.

R. M. Claramunt, A. Martínez-Fernández y E. Quintanilla.

"Nuevos procedimientos de síntesis de 1-(3,5-dimetil-4-nitropirazol-1-il) adamantan-3-ol"

Patentes Españolas

N^{OS} de Registro 550.383 (1985)

550.384 (1985)

CENTRUM PHARMACEUTICAL INTERNACIONAL

España.

F. J. Catalán, R. M. Claramunt, M. D. Santa María, R. Sastre, C. Foces-Foces, F. H. Cano y J. Elguero.

"Procedimiento de síntesis de mono y bis (3-R₃-4-R₄-5-R₅-pirazol-1-il)-1,4-dihidroxibencenos.

Patentes Españolas

N^o de Registro 8.901.557 (1989)

CSIC, UAM, UNED

España.

F. J. Catalán, R. M. Claramunt, M. D. Santa María, R. Sastre, C. Foces-Foces, F. H. Cano y J. Elguero.

"Procedimiento de obtención de pirazolil dihidroxi-1,4-bencenos y aplicaciones de estos compuestos".

Patentes Españolas

N^o de Registro 9.002.995 (1990)

CSIC, UAM, UNED.

España.

Estancias en Centros extranjeros

Université des Sciences et Techniques du Languedoc.

Montpellier, FRANCIA, 1970-71, 1 año.

Systemes bicycliques dérivés de l'aza -3a-pentalene.

University of East Anglia.

Norwich, GRAN BRETAÑA, 1974-75, 8 meses.

Pyridium salts.

Université de l'Etat à Mons.

Mons, BELGICA, 1975, 2 mes.

Comportement sous l'impact électronique de différents hétérocycles.

Chemical Center.

Lund, SUECIA, 1975, 2 mes.

Carbon-13 Nuclear Magnetic Resonance studies.

Université d' Aix-Marsella III-Chimie Organique.

Marsella, FRANCIA, 1975-79, 4 años

Modern methods of building optimal experimental matrices.

Contribuciones a Congresos

A. Messeguer y R. M. Claramunt.

"Síntesis de derivados de la Nor-petidina"

Symposium Química Medico-Farmacéutica

Barcelona, Septiembre 1970, p.17.

C. Guimon, S. Khayar, G. Pfister-Guillouzo, R. M. Claramunt, J. Elguero

"Étude par spectroscopie photoélectronique à température variable de la tetrazolo[1,5-a]pyridine"

8^{me} Colloque de Chimie Hétérocyclique

Université de Rennes I, 6-8 octobre 1982

R. M. Claramunt, J. Elguero, D. Mathieu, R. Phan-Tan-Luu

"Elección de anilinas para estudios QSAR"

II Congreso Nacional de Química Terapéutica

Madrid, 24-27 mayo 1982

P. Cabildo, R. M. Claramunt y J. Elguero.

"Síntesis de 1-adamantilpirazoles con actividad biológica"

XIX Rencontres Internationales de Chimie Therapeutique

Pamplona, 1983.

P. Cabildo, R. M. Claramunt, D. Sanz, M. C. Foces-Foces, F. Hernandez-Cano, J. Catalán, y J. Elguero.

"Estudio estructural de 1-(1-adamantil)pirazoles: geometría cristalina y espectroscopia RMN de carbono-13"

III reunión hispano-francesa de química orgánica

Aix-en Provence (Francia), Mayo, 1984.

A. R. Martínez Fernández, J. A. Escario, A. M. Igea, R. Claramunt

"Actividad antiamebiasica de compuestos de nueva síntesis sobre *Entamoeba invadens*"

I Reunión científica de la Asociación de Protozoólogos de Lengua Española

Madrid, 18 marzo 1985.

J. A. Escario, M. Contreras, A. M. Igea, R. Claramunt

"Ensayos de actividad antiprotozoasica de nitropirazoles de nueva síntesis"

IV Congreso Nacional de Parasitología

Tenerife, 9-13 julio 1985.

J. A. Escario, M. Contreras, A. R. Martínez, E. Alcalde, C. Ochoa, R. Claramunt

"Antichromonal activity of certain heterocycles of new synthesis"

International Symposium on Trichomonads and Trichomoniasis, a Satellite Meeting of the VIII International congress of Protozoology

Prague, 2-7 julio, 1985

R. M. Claramunt, J. Elguero y D. Sanz.

"Síntesis, estructura y propiedades espectroscópicas de adamantilazoles y benzazoles"

XX Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química

Castellón, Septiembre, 1984.

R. M. Claramunt, J. Elguero y D. Sanz.

"Síntesis de 1-(1-adamantil)-4-hidroxi-pirazolo-(3,4-d)-pirimidinas"

XI Reunión Bienal de Química Orgánica

Valladolid, Septiembre, 1985.

P. Cabildo, R. M. Claramunt, J. L. Lavandera, J. Torres y J. Elguero.

"Reacción de azoles y benzazoles con 1,2-dihaloetanos"

XI Reunión Bienal de Química Orgánica

Valladolid, Septiembre, 1985.

P. Cabildo, R. M. Claramunt, D. Sanz, B. Alarcón, M. E. Gonzalez, J. del Rio, P. Sanchez.

"Estudio de las propiedades biológicas de N-adamantil azoles y benzazoles"

IV Congreso nacional de la sociedad de química terapéutica

Sitges, Octubre, 1985.

- C. López, R. M. Claramunt, C. Pueyo de la Cuesta y M. Ruíz Rubio.
"Mutagenicidad de derivados de pirazol"
IV Congreso nacional de la sociedad de química terapéutica
Sitges, Octubre, 1985.
- M. C. López Gallego, J. Elguero Bertolini, P. Ballesteros García y R. M. Claramunt.
"Reacciones de azoles con clorobenzaldehidos y aldehidos heterocíclicos"
XXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química,
Santiago de Compostela, septiembre 1986, p. 221.
- D. Sanz del Castillo, P. Cabildo Miranda, R. M. Claramunt Vallespi, J. Elguero.
"Formación e identificación espectroscópica de C-Adamantilazoles".
XXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Santiago de Compostela, septiembre 1986, p. 629.
- P. Ballesteros García, R. M. Claramunt.
"Utilización del TDA-1 como catalizador en reacciones SNAr en Cloropiridinas"
XXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Santiago de Compostela, 1986, p.212.
- P. Cabildo Miranda, D. Sanz del Castillo, R. M. Claramunt, G. Guiheneuf, K. Sraidi y J. Elguero.
"Determinación de la acidez y basicidad de azoles mediante el estudio de su asociación con *N*-óxido de piridina y 3,4-dinitrofenol"
XXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Santiago de Compostela, septiembre 1986, p. 216.
- J. Catalán Sierra, M. Sánchez Cabezano, J. L. G. de Paz, P. Pérez, J. Laynez, M. Menéndez, R. M. Claramunt y J. Elguero.
"Basicidad y Acidez de Azoles, efecto de Disolvente"
XXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Santiago de Compostela, septiembre 1986, p. 668.
- J. Catalán, R. M. Claramunt, J. Elguero, J. Laynez, M. Menéndez.
"Basicity and Acidity of Azoles and Benzazoles. A Thermodynamic Study."
JCAT'86: Journées de Calorimétrie d'Analyse Thermique et de Thermodynamique Chimique
Universià di Ferrara, 27-30 octubre 1986.
- P. Molina Buendía, M. Alajarin Ceron, M. J. Pérez de Vega, J. Palazon, C. Foces-Foces, F. Hernández Cano, R. M. Claramunt y J. Elguero.
X-Ray Study of Liquid Compounds: Host Guest Inclusion Compounds of 1,2,4-Triazolo (3,4-b) (1,3,4) thiadiazinium salts with alcohols"
XII European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
Reims, septiembre 1986, p. 104.
- G. Serra, B. Mester, J. Elguero, R. M. Claramunt, G. Gómez Alarcón.
"Síntesis y screening farmacológico de derivados nitrofuránicos y nitrotiofénicos"
III Reunión Latinoamericana de Ciencias Farmacéuticas
Montevideo (Uruguay), 30 noviembre-5 diciembre 1986, p.41
- B. Mester, R. M. Claramunt, J. Elguero, S. Castanys, A. Osuna
"Actividad frente a *Trypanosoma cruzi* de Análogos de Nifurtimox"
III Reunión Latinoamericana de Ciencias Farmacéuticas
Montevideo (Uruguay), 30 noviembre-5 diciembre 1986
- E. Alejandro-Duran, M. Ruiz-Rubio, R. M. Claramunt, C. López y C. Pueyo.
"Mutagenicity of antiparasitic drugs in *Salmonella typhimurium*"
Wurgler, F. E. European Environmental Mutagen Society.
Zurich. XVII Annual meeting 1987, p. 108
- J. L. Lavandera, J. Torres, P. Cabildo, R. M. Claramunt y P. Domiano.
"Características estructurales de complejos de 1,2-bis (pirazol-1-il) etano con cobalto (II), níquel (II), cobre (II) y cinc (II)"
XII Reunión Bienal Grupo Química Orgánica.
Córdoba, 1987, P. 177.

- R. M. Claramunt, C. López, M. A. Esteruelas, M. C. Apreada, C. Foces-Foces, F. H. Cano y J. Elguero.
"Síntesis y Estudio de las Propiedades Estructurales y complejantes de Tris-y Tetrakis-(pirazol-1-il) metanos"
XII Reunión Bienal Grupo Química Orgánica.
Córdoba, 1987, p.295-296.
- P. Ballesteros, M. C. López, R. M. Claramunt, C. Roussel, A. Chemlal y J. Elguero.
"Resolución de Isómeros ópticos mediante cromatografía líquida sobre triacetilcelulosa (TAC) I. Enantiómeros del 3,5-Dimetil-4,4-Dibromo-1,1-Bispirazolil fenil metano"
XII Reunión Bienal Grupo Química Orgánica.
Córdoba, 1987, p. 303-304.
- C. López, R. M. Claramunt, C. Roussel, A. Chemlal, J. Subiron y A. Virgili.
"Resolución de tsómeros ópticos mediante cromatografía líquida sobre triacetilcelulosa (TAC) II. Estereoisómeros del tris (3,5-Dimetilpirazol-1-il)metano"
XII Reunión Bienal Grupo Química Orgánica.
Córdoba, 1987, p. 305-306.
- D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
"Reacción de N-Aminoazoles y benzazoles con bromoadamantano"
XII Reunión Bienal Grupo Química Orgánica.
Córdoba 1987, p. 307-308.
- D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
"N-(1-Adamantilamino) Azoles y benzazoles"
XI International Congress of Heterocyclic Chemistry.
Heidelberg, 1987, P. 122.
- P. Molina, M. Alajarin, C. López, R. M. Claramunt y J. Elguero.
"Phosphorous-Betaines from iminophosphoranes derived from N-aminoheterocycles and aliphatic isocyanates"
XI International Congress of Heterocyclic Chemistry.
Heidelberg, 1987, p. 274.
- B. Mester, R. M. Claramunt, J. Lorenzo y G. Gómez-Alarcón.
"Acción Antifúngica de nuevos derivados de 5-nitrofurfural"
V Congreso Internacional de la Sociedad Española de Química Terapéutica-I Congreso Hispano-Portugués de Química Terapéutica.
Santiago de Compostela, 1987, p. 58.
- D. Sanz, R. M. Claramunt, J. Elguero, J. Álvarez-Builla y F. Gago.
"Estudio por HPLC de N-(1-adamantil) azoles. Determinación de la constante π del grupo adamantilo"
III Congreso Internacional de Ciencias Farmacéuticas.
Barcelona, 1987, P. 195.
- D. Sanz, C. López, R. M. Claramunt, C. Roussel, C. Jaime y J. Elguero.
"Separación de enantiómeros del tris (2-metilbencimidazol-1-il) metano mediante triacetilcelulosa"
V Reunión Hispano-Francesa de Química Orgánica.
La Grande Motte, Francia, 9-12 mayo 1988, p.60
- M. Paulino, G. Serra, B. Mester, R. M. Claramunt, A. O. Stoppani
"Estudio de la relación estructura-actividad para derivados del 5-nitrofurfural usando técnicas cromatográficas y computacionales"
II Congreso Latinoamericano de Cromatografía
Buenos Aires, Argentina, 11-20 octubre 1988
- J. Catalán, F. Fabero, M. S. Guijarro, R. M. Claramunt, M. D. Santa María, C. Foces-Foces, F. H. Cano, J. Elguero y R. Sastre.
"Photoinduced intramolecular proton transfer as the mechanism of ultraviolet stabilizers"
XIII European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
Friburgo, Suiza, 1988, p. 51
- V. López, J. Catalán, C. López, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
"Indirect Determination of pK electrochemical Measures. Study of substituted pyrazoles"
Journées d' Electrochimie.
Montpellier-Francia, 1989.

- D. Sanz, R. M. Claramunt, F. Fabero, M. C. Foces-Foces, F. H. Cano y J. Elguero.
 "The structure of N-Aminoazoles"
Sixth European Symposium on Organic Chemistry.
 Belgrado, Yugoslavia, 1989, p. 368.
- C. López, D. Sanz, R. M. Claramunt, J. Elguero, C. Roussel y R. Faure.
 "Enantiomeric Resolution of tris (2-methylbenzimidazol-1-yl) methane by liquid chromatography on triacetylcelulose"
Sixth European Symposium on Organic Chemistry.
 Belgrado, Yugoslavia, 1989, p. 159.
- M. D. Santa María, D. Sanz, P. Ballesteros, P. Cabildo y R. M. Claramunt.
 "Nucleophilic addition of N-unsubstituted pyrazoles and benzimidazoles to p-benzoquinone"
Sixth European Symposium on Organic Chemistry.
 Belgrado, Yugoslavia, 1989, p.132.
- G. I. Iranzo, M. A. Ferraris, J. D. Pérez, D. Sanz, P. Cabildo, R. M. Claramunt y J. Elguero.
 "Flash Vacuum Thermolysis (FVT) of 1-adamantylpyrazole and 1-adamantylindazole"
Sixth European Symposium on Organic Chemistry.
 Belgrado, Yugoslavia, 1989, p. 152.
- M. T. Cañada, P. Ballesteros, R. M. Claramunt y J. Elguero.
 "Studies on the thermal rearrangement of 2-methoxy pyridine N-oxides to 1-methoxy pyridin-2-ones"
Sixth European Symposium on Organic Chemistry.
 Belgrado, Yugoslavia, 1989, p. 157.
- R. M. Claramunt, J. Elguero, C. Foces-Foces y F. Hernández Cano.
 "Formación of chiral helical crystals by intermolecular hydrogen bonding of nonchiral molecules: the case of aromatic compounds"
Workshop on Supramolecular Organic Chemistry and Photochemistry.
 Saarbrücken, Alemania, 1989, p.15.
- P. Cabildo, R. M. Claramunt, C. López, D. Sanz, J. Elguero, D. Carmona, M. Esteban y L. A. Oro.
 "3,5-Bis (4-methylpyrazol-1-yl)-4-methyl pyrazole-rhodium (I) complexes"
12th International Congress of Heterocyclic Chemistry.
 Jerusalén, Israel, 1989, p. A.8.
- B. Mester, G. Serra, R. M. Claramunt, A. Gómez, J. A. Escario, J. Atienza.
 "New antiparasitic drugs: N-(5-Nitrothenylidene) aminoazoles"
12th International Congress of Heterocyclic Chemistry.
 Jerusalén, Israel, 1989, p. A.33.
- R. Sastre, F. Catalina, J. L. Mateo, R. Claramunt, M. D. Santa María, J. Catalán
 "Mecanismo de fotoestabilización de poliestirenopor dihidroxifenil-pirazoles como aditivos" [13-C-10]
23 Reunión Bienal de la RSEQ
 Salamanca, 23-28 septiembre 1990
- G. I. Yranzo, R. M. Claramunt, P. Cabildo, T. Cañada, H. Homan, R. Notario y J. L. M. Abboud.
 "Intrinsic Basicities of Pyrazole Derivatives"
XIVth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
 Toledo, España, 1990.
- M. D. Santa María, P. Ballesteros y R. M. Claramunt.
 "On the mechanism of pyrazole addition to quinones"
XIVth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
 Toledo, España, 1990.
- D. Sanz, R. M. Claramunt, L. Salazar y M. Espada.
 "Rearrangement of 1-amino and 1-alkylaminopyrazoles to 5-aminopyrazoles"
XIVth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
 Toledo, España, 1990.
- M. C. López, P. Ballesteros, R. M. Claramunt, J. F. K. Wilshire y J. Rosevear.
 "Reactions of Azoles with ortho- and para-fluorobenzaldehydes"
XIVth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.

Toledo, España, 1990.

J. L. Lavandera, J. Torres, R. M. Claramunt y J. Elguero.
"1,1,1,-Tris (Pyrazol-1'-yl) alkanes"
XIVth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
Toledo, España, 1990.

C. López, R. M. Claramunt, D. Sanz, C. Foces-Foces, F. H. Cano y E. Cayon.
"Structure of Bis-, Tris-, and Tetrakis-Pyrazolylborates"
XIVth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
Toledo, España, 1990.

P. Cornago, M. D. Santa María, R. M. Claramunt, D. Carmona, M. Esteban y L. A. Oro.
"2, 5-Bis (pyrazol-1'-yl)-1,4-Dihydroxibenzene-Rhodium (I) and-Iridium (I) Complexes"
XIVth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
Toledo, España, 1990.

V. López y R. M. Claramunt.
"Comportamiento voltamétrico de algunos derivados de azoles con pentaciano ferrato (II). Cálculo de k_0 y α a diferentes valores de pH"
IX Congreso Iberoamericano de Electroquímica.
La Laguna (Tenerife), España, 1990.

C. Roussel, J. L. Stein, D. Thiery, V. Bobosik, C. López, R. M. Claramunt y J. Elguero.
"Separation on chiral HPLC columns of bis- and tris-(benzimidazol-1-yl) methanes"
Thirteenth International Congress of Heterocyclic Chemistry.
Oregón, Agosto 1991.

M. C. López, P. Ballesteros, R. M. Claramunt, M. Cano, J. V. Heras, E. Pinilla, A. Monge y E. Gutiérrez.
"1,1'-Bisindazolil, 2'-Piridilmetano. Estructura cristalina de [Rh (NBD) (L-L)] PF₆ "
XI Reunión Anual del Grupo Especializado de Química Órgano metálica.
El Escorial, octubre 1991, p. 42

M. C. López, R. M. Claramunt y P. Ballesteros.
"Synthesis and Isomerization of N,N'-BIS-(Indazolyl) Alkanes"
XV European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
Noorwijkerhout, Holanda, 12-15 julio 1992.

J. Catalán, F. Fabero, R. M. Claramunt, M. D. Santa María, M. C. Foces-Foces, F. Hernández-Cano, M. Martínez-Ripoll, J. Elguero y R. Sastre.
"New Ultraviolet Stabilizers: 3-and 5- (2'-Hydroxyphenyl) Pyrazoles"
XV European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
Noorwijkerhout, Holanda, 12-15 julio 1992.

D. Sanz, R. M. Claramunt, J. Dotor, A. L. Llamas-Saiz, M. C. Foces-Foces y J. Elguero.
"The crystal Structures of 2-(2-methoxyphenyl)perimidine and its hemihydrate"
XV European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
Noorwijkerhout, Holanda, 12-15 julio 1992.

F. Toda, K. Tanaka, J. Elguero, C. López, R. M. Claramunt, A. L. Llamas-Saiz y M. C. Foces-Foces.
"Freezing of equilibrium in pyrazole and 3,5-dimethylpyrazole by complex formation with 1,1-Bis (2,4-dimethylphenyl) but-2-yn-1-ol and 1,1-Bis (4-hydroxyphenyl) ciclohexane. X-ray crystal structure and CP/MAS ¹³C NMR of the complexes"
XV European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
Noorwijkerhout, Holanda, 12-15 julio 1992.

P. Cornago, C. Escolástico, M. D. Santa María y R. M. Claramunt, D. Carmona, M. Esteban, L. A. Oro, M. C. Foces-Foces y A. L. Llamas-Saiz.
"2,5-Bis (Pyrazol-1'-yl) -1,4-dihydroxybenzene-rhodium (III) and iridium (III) complexes"
XV European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
Noorwijkerhout, Holanda, 12-15 julio 1992.

G. Boyer, R. M. Claramunt, J. Elguero, A. Llamas Saiz y M. C. Foces-Foces.
"Bisheteroaryl derivatives as new Host compounds in Inclusion chemistry"
XV European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.

Noorwijkerhout, Holanda, 12-15 julio 1992.

C. Escolástico, M. D. Santa Maria y R. M. Claramunt.
"Imidazole and Benzimidazole Addition to Quinones"
XV European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
Noorwijkerhout, Holanda, 12-15 julio 1992.

P. Ballesteros, R. M. Claramunt, M. C. López, M. Cano, J. V. Heras, E. Pinilla, A. Monge
"Rhodium (I) and molybdenum (0) complexes containing bis(indazol-1-yl)pyrid-2-yl)methane (BIPM) and bis(indazol-1-yl)(phenylmethane (BIPhM) as ligands" [PC1]
Euchem Conference on Nitrogen Ligands in Organometallic Chemistry and Homogeneous Catalysis
Alghero (Italia), 10-15 mayo 1992

N. A. García, F. Fabero, J. Catalán, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
"Mecanismo "anti-TICT" en los N-Aminobenzazoles?"
24 Reunión Biental Real Sociedad Española de Química.
Torremolinos, España, 1992.

J. C. del Valle, J. Catalán, D. Sanz, R. M. Claramunt, J. Dotor, A. L. Llamas, C. Foces-Foces y J. Elguero.
"Fototransferencia protónica en la 2-(2-hidroxifenil) perimidina".
II Congreso de Fotoquímica
Poblet, España, 1993.

R. M. Claramunt, C. Escolástico, M. D. Santa Maria y V. López.
"Electrochemical behaviour of substituted quinones".
VIII European Symposium on Organic Chemistry
Sitges, España, 1993.

C. T. Supuran, A. T. Balaba, P. Cabildo, R. M. Claramunt, J. L. Lavandera, J. Elguero
"Carbonic anhidrase activators. Isozyme activation by bisazolyl-methanes, -ethanes and related azoles"
VIII Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica
Salamanca, 28 septiembre- 1 octubre 1993

R. M. Claramunt, C. López, C. Jaime, A. Virgili, C. Marco y J. Elguero.
"The conformation of trispyrazolymethanes"
Mini International Symposium on Solid State Organic Chemistry
Matsuyama, Japon, 1993.

J. L. Aubagnac, I. Gilles, R. M. Claramunt, C. Escolástico y D. Sanz del Castillo.
"Spectrométries de masse FAB,FRIT-FAB, ESI et réactivité chimique"
VIII Jornadas Hispano-Francesas de Química Orgánica.
Elizondo (Navarra), España, 1994.

P. Cabildo, R. M. Claramunt, I. Forfar, C. Foces-Foces, A. L. Llamas y J. Elguero.
"Adamantilación de derivados de NH-pirazol: Estudios mecanísticos y estructurales"
VIII Jornadas Hispano-Francesas de Química Orgánica.
Elizondo (Navarra), España, 1994.

J. L. Aubagnac, I. Gilles, R. M. Claramunt, D. Sanz, G. Gosselin y P. Dumy.
" Spectrométrie de masse FAB et réduction"
Journee Regionale de la Societe Française de Chimie
Toulouse, Francia, 1994.

P. Cabildo, A. L. Llamas Saiz, C. Foces-Foces, R. M. Claramunt, J. Catalán, y J. C. del Valle.
"Synthesis and Molecular structures of 2-phenyl and 2-(2'-hydroxyphenyl)imidazoles"
IX European Symposium on Organic Chemistry
Varsovia, Polonia, Junio 18-23, 1995.

P. Cornago, J. L. Lavandera, P. Cabildo, R. M. Claramunt, M. L. Jimeno y J. Elguero.
"Synthesis, Structural and Conformational analysis of heterocyclic analoges of dibenzo[a,e]cycloota-1,5-diene"
IX European Symposium on Organic Chemistry
Varsovia, Polonia, Junio 18-23, 1995.

M. D. Santa Maria y R. M. Claramunt.
"Studies on the reactivity of pentafluoro pyridine with pyrazole anions"

IX European Symposium on Organic Chemistry
Varsovia, Polonia, Junio 18-23, 1995.

C. Escolástico, R. M. Claramunt, C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz y J. Elguero.

"Aromatic propellenes: hexapyrazol benzenes"

IX European Symposium on Organic Chemistry
Varsovia, Polonia, Junio 18-23, 1995.

D. Sanz, C. López, R. M. Claramunt, J. Elguero y S. Trofimenko.

"An ^1H and ^{13}C NMR study of potassium and thallium salts tris- and tetrakis-(pyrazol-1-yl)borates. Some ^1H - ^{205}Tl and ^{13}C - ^{205}Tl residual coupling constants"

IX European Symposium on Organic Chemistry
Varsovia, Polonia, Junio 18-23, 1995.

L. Infantes, C. Foces-Foces, R. M. Claramunt y J. Elguero

"Separación quiral por cocrystalización: Estructura relativa por cristalografía de Rayos X de un complejo de inclusión en un host ópticamente activo"

VIII Symposium del Grupo Especializado de Cristalografía
Jaca (Huesca), España, 1995

C. Fernández-Castaño, C. Foces-Foces, F. H. Cano, R. M. Claramunt y J. Elguero.

"Estructuras moleculares y empaquetamiento de derivados heterocíclicos del hexafluorobenceno"

VIII Symposium del Grupo Especializado de Cristalografía
Jaca (Huesca), España, 1995.

P. Cabildo, R. M. Claramunt, D. Sanz, J. Elguero, C. Enjalbal y J. L. Aubagnac.

"Spectrométrie de masse FAB et spectrométrie de masse en tandem de cations hétérocycliques"

IX Journées Franco-Espagnoles de Chimie Organique
Aspet, Francia, 1996.

F. Toda, K. Tanaka, C. Foces-Foces, L. Infantes, R. M. Claramunt, C. López y J. Elguero.

"The structure of 3(5)-methyl-4-nitropyrazole included in (R,R)-(-)-trans-4,5-bis(hydroxydiphenyl)-2,2-dimethyl-1,3-dioxacyclopentane"

European Research Conference on Supramolecular Chemistry
Salamanca, España, 1996.

J. A. Jiménez, R. M. Claramunt, D. Sanz, C. López, M. L. Jimeno, J. Elguero y A. Fruchier.

"Effect of substituents on the ^{15}N NMR parameters of azoles"

XVIIth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry
Regensburg, Alemania, 1996.

P. Cornago, C. Escolástico, M. D. Santa María, R. M. Claramunt, C. Fernández-Castaño, C. Foces-Foces, J. P. Fayet y J. Elguero.

"Aromatic Propellenes. Synthesis, X-Ray Structures and Conformational Study of Polypyrazolylpyridines"

XVIIth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry
Regensburg, Alemania, 1996.

P. Cabildo, J. L. Aubagnac, R. M. Claramunt, J. Elguero y D. Sanz.

"Synthesis and Structural Study of Heterocyclophanes"

XVIIth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry
Regensburg, Alemania, 1996.

D. Sanz, P. Cabildo, R. M. Claramunt, J. Elguero, C. Enjalbal y J. L. Aubagnac.

"Positive ion and negative ion FAB (Fast Atom Bombardment) Mass Spectrometry of some bisazolium salts"

XVIIth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry
Regensburg, Alemania, 1996.

R. M. Claramunt, M. D. Santa María, I. Forfar, F. Aguilar-Parrilla, M. Minguet-Bonvehí, O. Klein, H. H. Limbach y J. Elguero.

"Molecular Structure and Dynamics of Adamantyl Substituted Pyrazoles"

XVIIth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry
Regensburg, Alemania, 1996.

J. A. Jiménez, R. M. Claramunt, P. Cabildo, J. Elguero, C. Foces-Foces, L. Infantes, J. Quiroga y B. Insausti.

"Tautomerism studies in 3(5)-Amino-5(3)-phenylpyrazole derivatives"

Tenth European Symposium on Organic Chemistry (ESOC 10)
Basilea, Suiza, 1997.

P. Cornago, C. Escolástico, J. L. Lavandera, M. D. Santa María, R. M. Claramunt y J. Elguero.
"Aromatic Propellenes: Hexakisazolybenzenes and Octakisazolylnaphthalenes"
Tenth European Symposium on Organic Chemistry (ESOC 10)
Basilea, Suiza, 1997.

A. L. Llamas-Saiz, C. Fernández-Castaño, C. Foces-Foces, R. M. Claramunt, C. Escolástico, N. Jagerovic y J. Elguero.
"Aromatic Propellenes, Conformational Isomerism, Polymorphism and Host-Guest Complexes"
Seventeenthth European Crystallographic Meeting
Lisboa, Portugal, 1997.

C. López, P. Lorente, H. Benedict, R. M. Claramunt, J. Marín, C. Foces-Foces, A. L. Llamas-Saiz, J. Elguero y H. H. Limbach.
"Localization of Hydrogen Bond Deuterons in Proton Sponges by Dipolar Solid State ¹⁵N NMR Spectroscopy"
Hydrogen Transfer Experimental and Theory, Bunsentagung 1997
Berlin, Alemania, 10-13 September, 1997.

O. Peters, C. López, R. M. Claramunt, C. Foces-Foces, O. Klein, H. H. Limbach y J. Elguero.
"Proton Transfer in Solid NH-1,2,4-Triazoles"
Hydrogen Transfer Experimental and Theory, Bunsentagung 1997
Berlin, Alemania, 10-13 September, 1997.

D. Sanz, M. A. Ponce, R. M. Claramunt, C. Fernández-Castaño, C. Foces-Foces y J. Elguero.
"Azinas Simétricas y Asimétricas Derivadas del Adamantano"
XXVI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Cádiz, España, 1997.

M. A. Ponce, D. Sanz, R. M. Claramunt, C. Fernández-Castaño, C. Foces-Foces y J. Elguero.
"Preparación de Adamantilazinas"
XI Simposio Nacional de Química Orgánica
Villa Giardino (Córdoba, Argentina) 1997.

D. Sanz, R. M. Claramunt, P. Cabildo, I. Alkorta, J. Elguero y S. A. Bourne.
"Synthesis and Structural Studies of [1₄]Paracyclo-bis(1,2)pyrazoliumphane Dibromide"
XVIIIth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry
Rouen, Francia, 1998.

P. Cornago, M. D. Santa María, R. M. Claramunt, C. Fernández-Castaño, C. Foces-Foces, I. Alkorta y J. Elguero.
"Synthesis and Conformational Study of Hexakis(2-methylimidazol-1-yl)- and Hexakis-(benzimidazol-1-yl)-Benzenes"
XVIIIth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry
Rouen, Francia, 1998.

P. Cabildo, R. M. Claramunt, J. Quiroga, B. Insuasty, A. Hormaza y J. Elguero.
"Synthesis, Molecular Structure and Tautomerism of 1(2)*H*-Dihydropyrazolo[3,4-*b*]pyridin-6-ones"
XVIIIth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry
Rouen, Francia, 1998.

C. Escolástico, M. A. Torres, M. D. Santa María, R. M. Claramunt, N. Jagerovic y R. Sastre.
"Spectroscopic Properties of two Highly Substituted PAHs Heteroanalogs, Octakis(pyrazol-1-yl)naphthalene and Octakis(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)naphthalene"
XVIIIth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry
Rouen, Francia, 1998.

M. Pérez Torralba, S. H. Alarcón, P. Cabildo, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
"Intramolecularly Hydrogen Bonded Systems"
XVIIIth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry
Rouen, Francia, 1998.

S. H. Alarcón, M. Pérez Torralba, P. Cabildo, R. M. Claramunt y J. Elguero.

- “RMN y Difracción de Rayos-X aplicados al estudio del Enlace de Hidrógeno en N,N'-difenil-6-aminopentafulveno-2-aldehído”
XXII Congreso Argentino de Química
 La Plata, Argentina, 1998.
- S. H. Alarcón, M. Pérez Torralba, P. Cabildo, R. M. Claramunt y J. Elguero.
 “Transferencia de protones en N,N'-R¹,R²-6-aminopentafulveno-2-aldehídos. Estudio por RMN y cálculos semiempíricos”
XII Congreso Argentino de Fisicoquímica y I Congreso de Fisicoquímica del Mercosur
 Santa Fé, Argentina, 1999.
- P. Cornago, R. M. Claramunt, D. Sanz, C. Foces-Foces y J. Elguero.
 “Syntheses and E/Z Isomerism Studies in Azolides”
11th European Symposium on Organic Chemistry
 Göteborg, Suecia, 1999.
- P. Cabildo, R. M. Claramunt, I. Forfar, J. Lafuente, J. Barberá, R. Giménez y J. Elguero.
 “Synthesis and Mesogenic Properties of Schiff Bases derived from Aminopyrazoles”
11th European Symposium on Organic Chemistry
 Göteborg, Suecia, 1999.
- D. Sanz, M. Pérez-Torralba, R. M. Claramunt, J. Elguero, M. Pietrzak y H.-H. Limbach.
 “Derivados Heterocíclicos de 6-Aminofulveno-1-Aldehído”
XXVII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
 La Laguna -Tenerife, España, 1999.
- M. A. García, C. López, R. M. Claramunt, O. Klein, D. Schagen, H.-H. Limbach y J. Elguero.
 “Solid State Behaviour of 3,5-Dichloro and 3,5-dibromo-1H-1,2,4-Triazoles”
17th International Congress of Heterocyclic Chemistry
 Viena, Austria, 1999.
- M. Pérez Torralba, D. Sanz, R. M. Claramunt and J. Elguero.
 “Symmetrical and unsymmetrical 6-aminofulvene-1-aldehído heterocyclic derivatives”
XVIIth International Congress of Heterocyclic Chemistry.
 Viena, Austria, 1999.
- M. Pérez-Torralba, D. Sanz, R. M. Claramunt, J. Elguero, C. Foces-Foces, M. Pietrzak y H.-H. Limbach.
 “[¹⁵N₂]-Bis-6-aminofulvene-1-aldehído derivatives”
International Symposium on Physical Organic Chemistry
 Miraflores de la Sierra (Madrid), España, 1999.
- M. A. García, C. López, R. M. Claramunt y J. Elguero.
 “Tautomerism and Hydrogen Bond in NH-1,2,4-Triazoles”
International Symposium on Physical Organic Chemistry
 Miraflores de la Sierra (Madrid), España, 1999.
- M. Pietrzak, H.H. Limbach, M. Pérez-Torralba, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
 “²J_{NN} Coupling Constants across Intramolecular Hydrogen Bonds in 6-Aminopentafulvene-2-Aldehído Derivatives”
Symposium on Application of Magnetic Resonance in Chemistry and Related Areas (To the memory of Prof. L. Stefaniak)
 Varsovia, Polonia, 1999.
- R. M. Claramunt, J. Elguero, C. Escolástico, F. Gómez de la Torre, A. Guerrero, F. A. Jalón, B. R. Manzano y A. Rodríguez.
 “New Complexes with pyrazolyl N-donor ligands and late transition metals”
European Mediterranean Conference in Inorganic Chemistry. 5th FGIPS Meeting in Inorganic Chemistry
 Toulouse, Francia, 1999.
- R. M. Claramunt, J. Elguero, C. Escolástico, A. Guerrero, F. A. Jalón, B. R. Manzano y A. Rodríguez.
 “Síntesis y caracterización de nuevos derivados de metales Ru y Pt con ligandos N-dadores polidentados”
XIX Reunión del Grupo Especializado de Química Organometálica
 Valladolid, España, 2000.
- M. Pietrzak, H.H. Limbach, M. Pérez Torralba, D. Sanz, R. M. Claramunt, J. Elguero y E. Daltrozzi.

“New Method of Determination of $^2\text{hJ}_{\text{NN}}$ Coupling Constants Across Intramolecular Hydrogen Bonds”
12th European Experimental NMR Conference
Leipzig, Alemania, 2000.

M. A. García, C. López, R. M. Claramunt y J. Elguero.
“Intermolecular Interactions of N–H...N type between Pyrazoles and Imidazoles”
XIXth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
Aveiro, Portugal, 2000.

V. Milata, P. Cabildo, R. M. Claramunt, P. Cornago y J. Elguero.
“Tris(*N*-Azolyl- and *N*-Benzazolyl)-1,3,5-Triazines”
XIXth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
Aveiro, Portugal, 2000.

M. Pérez-Torrallba, S. H. Alarcón, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
“Synthesis of Nonclassical Aromatic Heterocyclic Systems: 6-Aminofulvene-1-alimine Derivatives”
XIXth European Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
Aveiro, Portugal, 2000.

S. H. Alarcón, A. C. Olivieri, M. Pérez-Torrallba, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
“Transferencia Intramolecular de Protones en Sistemas Aromáticos Clásicos y No-clásicos: Estudio por RMN Multinuclear, Rayos-X y Cálculos *ab initio*”
XII Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Orgánica.
San Martín de los Andes, Neuquén, Argentina, 2001.

P. Cornago, P. Cabildo, R. M. Claramunt, V. Milata, J. Elguero, F. A. Jalón, B. R. Manzano, A. Guerrero y A. Rodríguez.
“2,4,6-tris(3,5-dimethylpyrazol-1-yl)-1,3,5-triazines Silver(Y) and Palladium (II) Complexes”
12th European Symposium on Organic Chemistry.
Groningen, Holanda, 2001.

M. Pérez-Torrallba, D. Sanz, R. M. Claramunt.
“Synthesis of Non Classical Aromatic Heterocyclic Systems: 2-Aminotroponimines”
12th European Symposium on Organic Chemistry.
Groningen, Holanda, 2001.

P. Cornago, R. M. Claramunt, M. L. Gallego y M. Cano.
“Reactivity of poly[bis(3,5-alkyloxyphenyl)pyrazol-1-yl]triazine towards metal fragments”
6th FIGIPS.
Barcelona, España, 2001.

A. Guerrero, F. A. Jalón, B. R. Manzano, R. M. Claramunt, P. Cornago, V. Milata, J. Elguero, M. Maestro y J. Mahía.
“New Cu(I) complexes with pyrazolyl N. Donor ligands. Formation of Macrostructures”
6th FIGIPS.
Barcelona, España, 2001.

A. Guerrero, F. A. Jalón, B. R. Manzano, R. M. Claramunt, P. Cornago, V. Milata, J. Elguero.
“New Pd(II) complexes with pyrazolyl N-donor ligands. Fluxional behaviour”
6th FIGIPS. Barcelona, España, 2001.

R. M. Claramunt, M. Pérez-Torrallba, D. Sanz, J. Elguero, M. Pietrzak, U. Langer y H-H. Limbach.
“Solid State Behaviour of 6-aminofulvene-1-alimine derivatives”
2nd Alpine Conference on Solid State NMR.
Chamonix-Mont Blanc, Francia, 2001.

M. A. García, R. M. Claramunt, C. López, S. H. Alarcón y J. Elguero.
“The Structure of Halogeno-1,2,4-triazoles in solid state”
2nd Alpine Conference on Solid State NMR.
Chamonix-Mont Blanc, Francia, 2001.

F. Herranz, M. D. Santa María, R. M. Claramunt.
“Molecular recognition of urea derivatives”
2nd Transmediterranean Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
Bari, Italia, 2002.

- P. Cornago, R. M. Claramunt, M. L. Gallego, J. V. Heras, M. Cano.
 “New gold (I) and palladium (II) complexes with 2,4,6(3,5-bis-*p*-N-butoxyphenylpyrazolyl)-1,3,5-triazine”
2nd Transmediterranean Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
 Bari, Italia, 2002.
- D. Sanz, M. Pérez-Torralla y R. M. Claramunt.
 “2-Aminotroponimines bearing heterocyclic groups”
2nd Transmediterranean Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
 Bari, Italia, 2002.
- M. A. García, C. López, R. M. Claramunt, A. Kenz, M. Pierrot y J. Elguero.
 “Polymorphism versus desmotropy. The case of 3(5)-phenylpyrazole and 3-phenylindazole”
2nd Transmediterranean Colloquium on Heterocyclic Chemistry.
 Bari, Italia, 2002.
- A. Guerrero, F. A. Jalón, B. R. Manzano, R. M. Claramunt, P. Cabildo, P. Cornago, J. Elguero, V. Milata, M. Maestro y J. Mahía.
 “Effect of the Substitution in the Ligand over the geometry of the Metal Centres”
Euroconferencia on the Inorganic Side of Molecular Architecture.
 San Feliu de Guixols, España, 2002.
- R. M. Claramunt, D. Sanz del Castillo, J. Elguero, P. Noche, C. S. Raman, P. Martasek y B. S. S. Masters.
 “Molecular Recognition of 7-Nitroindazolone by Nitric Oxide Synthase”
XVIIth International Symposium on Medicinal Chemistry.
 Barcelona, España, 2002.
- C. López, M. D. Santa María, M. A. García, R. M. Claramunt, J. Elguero.
 “Study of polymorphism and tautomerism by SSNMR”
I Reunión Bienal del Grupo Especializado de RMN de la RSEQ.
 Calella (Barcelona), 2002.
- C. Enjalbal, P. Sanchez, J. Martínez, J-L. Aubagnac, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
 “Isotopic labeling in mass spectrometry: a re-visited procedure”
XIII Jornadas Hispano-Francesas de Química Orgánica.
 Balaruc (Francia), 17-18 de mayo, 2003.
- M. A. García, C. López, R. M. Claramunt, I. Alkorta y J. Elguero.
 “Efectos de fase y de protonación en pirazoles e imidazoles”
XXIX Reunión Bienal de Química- Centenario de las RSEQ Y RSEF.
 Madrid 7-11 de julio, 2003.
- M. A. Farrán, C. López y R. M. Claramunt.
 “Flavoquinonas en estado sólido: análisis, estructura y función”
XXIX Reunión Bienal de Química- Centenario de las RSEQ Y RSEF.
 Madrid 7-11 de julio, 2003.
- M. Pérez-Torralla, D. Sanz, R. M. Claramunt, M. R. Torres y E. Pinilla.
 “2-Aminotroponas y 2-aminotroponiminas: Tautomería y enlace de hidrógeno”
XXIX Reunión Bienal de Química- Centenario de las RSEQ Y RSEF.
 Madrid 7-11 de julio, 2003.
- A. Perona, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
 “Síntesis y reactividad de 3-hidroxi-4-piridincarbaldéido, modelo de la coenzima fosfato de piridoxal”
XXIX Reunión Bienal de Química- Centenario de las RSEQ Y RSEF.
 Madrid 7-11 de julio, 2003.
- F. Herranz, M. D. Santa María, R. M. Claramunt y J. Elguero.
 “Determinación de constantes de asociación de modelos de biotina con receptores artificiales”
XXIX Reunión Bienal de Química- Centenario de las RSEQ Y RSEF.
 Madrid 7-11 de julio, 2003.
- P. Cornago, R. M. Claramunt, M. Cano, J. V. Heras y M. L. Gallego.
 “Determinación de formas coordinativas de ligandos polidentados mediante espectroscopía de ¹⁵N RMN”
XXIX Reunión Bienal de Química- Centenario de las RSEQ Y RSEF.

Madrid 7-11 de julio, 2003.

M. C. Carrión, A. Guerrero, F. A. Jalón, B. R. Manzano, A. de la Hoz, R. M. Claramunt, V. Milata y J. Elguero.
"Cinco procesos fluxionales diferentes en complejos de polifluorofenilo de paladio (II)"
XXIX Reunión Bienal de Química- Centenario de las RSEQ Y RSEF.
Madrid 7-11 de julio, 2003.

P. Cabildo, R. M. Claramunt, P. Jiménez, M. V. Roux, J. Z. Dávalos, M. Temprado, J. Elguero, M. A. V. Ribeiro da Silva, M. D. M. C. Ribeiro da Silva, L. M. P. F. Amaral, O. Mó y M. Yáñez.
"Efectos del anillo y del sustituyente en las entalpías de formación: 2-Metil y 2-Etilbencimidazoles"
XXIX Reunión Bienal de Química- Centenario de las RSEQ Y RSEF.
Madrid 7-11 de julio, 2003.

D. Sanz, R. M. Claramunt y M. Pérez-Torralla.
"Solid State Behaviour of non Classical Aromatic Heterocyclic Systems"
3rd Alpine Conference on Solid State NMR.
Chamonix-Mont Blanc, Francia, 14-18 de Septiembre, 2003.

S. P. Brown, M. Loeffler, F. Koziol, C. Ochsenfeld, L. Emsley, C. López, M. A. García, I. Alkorta, J. Elguero y R. M. Claramunt .
"One-Bond and Multiple-Bond ¹³C-¹H MAS-J-HMQC Experiments: Campho[2,3-c]pyrazole"
3rd Alpine Conference on Solid State NMR.
Chamonix-Mont Blanc, Francia, 14-18 de Septiembre, 2003.

M. D. Santa María, F. Herranz, R. M. Claramunt, C. Jaime y J. Elguero.
"Experimental and theoretical studies of urea derivatives complexes with artificial receptors"
First World Congress on Synthetic receptors.
Lisboa (Portugal), 15-17 de Octubre, 2003.

F. Herranz, M. D. Santa María, R. M. Claramunt y J. Elguero.
"Synthetic receptors: theoretical and experimental studies of their interaction with ureas"
Twelfth FEChem Conference on Heterocycles in Bio-Organic Chemistry.
Siena (Italia), 20-24 de junio, 2004. **SC-02**

R. M. Claramunt, F. Herranz, M. D. Santa María y J. Elguero.
"Heterocyclic urea derivatives versus artificial receptors: a theoretical approach to the design of host-guest complexes"
XXL European Colloquium on Heterocyclic chemistry.
Sopron (Hungria), 12-15 de septiembre, 2004. **MP-21**

M. Pérez-Torralla, D. Sanz, R. M. Claramunt, E. Pinilla, M. R. Torres y J. Elguero.
"Solid state structure and tautomerism of 2-aminotroponimines studied by X-ray crystallography and multinuclear NMR spectroscopy"
The First EENC/AMPERE.
Lille (Francia), 6-11 Septiembre, 2004.

A. Perona, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
"Tautomerism and proton transfer in 4[(E)-(phenylimino)methyl]pyridin-3ol derivatives: Multinuclear NMR studies"
The First EENC/AMPERE.
Lille (Francia), 6-11 Septiembre, 2004.

D. Santa María, R. M. Claramunt, C. López, S. Lott, J. Elguero
"SSNMR Study of the tautomerism of acetylacetone included in a host matrix"
II Reunión Bienal de RMN, RSEQ
Santiago de Compostela (España), 19-22 Septiembre, 2004

A. Perona, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.
"Synthesis and spectroscopic properties of Schiff bases derived from 3-hydroxy-4-pyridinecarboxaldehyde"
TRAMECH-3.
Marrakech (Marruecos), 23-27 noviembre, 2004.

P. Cornago, R. M. Claramunt, M. Cano, J. V. Heras y M. L. Gallego
"NMR induced chemical shift effects on 3,5-bis-p-butoxyphenyl pyrazole by Silver (I), Palladium (II) and Gold (I) metals coordination"

TRAMECH-3.

Marrakech (Marruecos), 23-27 noviembre, 2004.

P. Cabildo, M. A. V. Ribeiro da Silva, M. D. M. C. Ribeiro da Silva, L. M. P. F. Amaral, P. Jimenez, M. V. Roux, J. Z. Dávalos, M. Temprado, R. M. Claramunt, J. Elguero, O. Mó y M. Yáñez .

“Experimental thermochemical study of two 2-alkylbenzimidazole isomers: propyl- and isopropylbenzimidazole”
TRAMECH-3.

Marrakech (Marruecos), 23-27 noviembre, 2004.

C. Pérez-Medina, C. López, R. M. Claramunt y J. Elguero.

“Search of new pyrazoles with biological activity”

TRAMECH-3.

Marrakech (Marruecos), 23-27 noviembre, 2004.

V. Torres, P. Cornago, R. M. Claramunt, V. Loshkin, A. Samat, E. Pinilla y M. R. Torres.

“Pyrazoles as building blocks in crystal engineering”

TRAMECH-3.

Marrakech (Marruecos), 23-27 noviembre, 2004.

R. M. Claramunt, P. Cornago, M. D. Santa María, V. Torres, E. Pinilla, M. R. Torres, J. Elguero.

”A Non-symmetric Disordered Tetramer: The Unusual Structure of 3(5)-ethyl-5(3)-phenyl-1H-pyrazole in the Solid State”

XX Congress of the International Union of Crystallography

Florenca (Italia), 23-31 agosto, 2005.

C. Pérez-Medina, M. Pérez-Torralla, C. López, R. M. Claramunt, P. Nioche y C. S. Raman.

“Búsqueda de nuevos inhibidores de la sintasa del óxido nítrico (NOS) derivados de indazol”

XIV Congreso Nacional de la Sociedad Española de Química Terapéutica

Bilbao, Septiembre, 2005.

M. A. Farrán, R. M. Claramunt, C. López, F. Herranz, M. R. Torres y E. Pinilla.

“Síntesis de ciclofanos de aloxazina como modelos para el estudio de las interacciones π - π en el centro activo de las monoaminooxidasas (MAO)”

XXX Reunión Bienal de la RSEQ.

Lugo, 19-23 septiembre, 2005.

C. Pérez-Medina, C. López and R. M. Claramunt.

“Theoretical studies on the tautomerism of 1,5,6,7-tetrahydro-4H-indazol-4-ones”

ECSOC-9. G001

1-27 noviembre, 2005. <http://www.usc.es/congresos/ecsoc/9/ECSOC9.HTM> & <http://www.mdpi.net/ecsoc/>

F. Herranz, M. D. Santa María and R. Claramunt.

“Host-Guest Chemistry of tolbutamide”

ECSOC-9. C016

1-27 noviembre, 2005. <http://www.usc.es/congresos/ecsoc/9/ECSOC9.HTM> & <http://www.mdpi.net/ecsoc/>

A. Perona, D. Sanz, R. Claramunt and J. Elguero.

“Syntheses and structural studies of new molecules involving hydrogen bonds”

ECSOC-9. A014

1-27 noviembre, 2005. <http://www.usc.es/congresos/ecsoc/9/ECSOC9.HTM> & <http://www.mdpi.net/ecsoc/>

P. Cornago, R. M. Claramunt, V. Torres, E. Pinilla, M. R. Torres y J. Elguero.

“A combined CPMAS/NMR and crystallographic study of 3(5)-(2-benzyl-phenyl)-5(3)-trifluoromethyl-1H-pyrazole”

TRAMECH-4

Aveiro (Portugal), 23-27 junio, 2006.

M. D. Santa María, R. M. Claramunt, M. A. García, M. A. P. Martins, N. Zanatta, H. G. Bonacorso, F. A. Rosa y J. Elguero.

“The structure in the solid state and in solution of 3(5)-trifluoromethyl-4,5(3)-polymethylenepyrazoles”

TRAMECH-4

Aveiro (Portugal), 23-27 junio, 2006.

A. Perona, D. Sanz, R. M. Claramunt, E. Pinilla, M. R. Torres y J. Elguero.

“Structural studies of novel tautomeric systems containing hydrogen bond”

TRAMECH-4

Aveiro (Portugal), 23-27 junio, 2006.

D. Sanz, A. Perona, R. M. Claramunt y J. Elguero.

“Tautomeric studies in acid media of Schiff bases derived from 3-hydroxy-4-pyridinecarboxaldehyde”

TRAMECH-4

Aveiro (Portugal), 23-27 junio, 2006.

C. Pérez-Medina, M. Pérez-Torralba, C. López y R. Claramunt.

“Synthesis and structural study of 4,5,6,7-tetrafluoroindazoles”

TRAMECH-4

Aveiro (Portugal), 23-27 junio, 2006.

R. M. Claramunt, C. López and J. Elguero.

“The structure of *Omeprazole* in the solid state: a ^{13}C and ^{15}N NMR/CPMAS study”

Euromar 2006

York (Reino Unido), 16-21 julio, 2006.

V. Milata, R. M. Claramunt, P. Cabildo, M. D. Santa María, P. Cornago, F. A. Jalón, B. R. Manzano, A. de la Hoz.

2,4,6-tris[(benz)azol-1-yl]-1,3,5-triazines and their properties

1st European Chemistry Congress.

Budapest (Hungria), Agosto, 2006.

M. A. Farrán, F. Herranz, G. Clarkson, C. López and R. M. Claramunt.

Synthesis of novel cycloflavinophanes for the complexation of biogenic amines.

XXII European Colloquium on Heterocyclic Chemistry

Bari (Italia), 2-6 septiembre, 2006.

M. Pérez-Torralba, R. M. Claramunt, I. Alkorta and J. Elguero.

Double addition of azoles to glyoxal.

XXII European Colloquium on Heterocyclic Chemistry

Bari (Italia), 2-6 septiembre, 2006.

R. M. Claramunt, C. López, M. D. Santa María, D. Sanz and J. Elguero.

The use of NMR spectroscopy to study tautomerism

III Biental del Grupo Especializado de Resonancia Magnética Nuclear (GERMN)

Sant Joan (Alicante), 15-18 octubre, 2006.

L. Bouissane, P. Cabildo, P. Cornago and R. M. Claramunt.

“Curcuminoid pyrazoles: Syntheses and structural properties”

ECSOC-10

1-30 noviembre, 2006. <http://www.usc.es/congresos/ecsoc/10/ECSOC10.HTM>

M. Blanco, R. M. Claramunt, C. Escolástico and D. Sanz.

“A study of the regioisomerism in pyrazole alkylation using environmental friendly microwave irradiation

ECSOC-10

1-30 noviembre, 2006. <http://www.usc.es/congresos/ecsoc/10/ECSOC10.HTM>

A. Perona, D. Sanz, R. M. Claramunt, E. Pinilla, M. R. Torres y J. Elguero.

“Protonation studies of Schiff bases using ^{13}C and ^{15}N -NMR spectroscopy”

ECSOC-10

1-30 noviembre, 2006. <http://www.usc.es/congresos/ecsoc/10/ECSOC10.HTM>

P. Cabildo, L. Bouissane, P. Cornago, R. M. Claramunt y J. Elguero.

“Synthesis and Biological Evaluation of Curcuminoid Pyrazoles”

10th Conference in Advanced Medicinal Chemistry

Thessaloniki (Grecia), 25-26 mayo, 2007.

P. Cornago, L. Bouissane y R. M. Claramunt.

“Synthesis and tautomerism study of new 3(5)-(2-benzylphenyl)-5(3)-R-1*H*-pyrazoles”

10th Conference in Advanced Medicinal Chemistry

Thessaloniki (Grecia), 25-26 mayo, 2007.

C. Escolástico, M. Blanco, R. M. Claramunt and D. Sanz.

“Green synthesis of bioactive 4-substituted pyrazoles”

10th Conference in Advanced Medicinal Chemistry
Thessaloniki (Grecia), 25-26 mayo, 2007.

D.Sanz, R. M. Claramunt, A. Saini, V. Kumar, R. Aggarwal, S.P. Singh, I. Alkorta and J. Elguero
"Pyrazolo[1,5-*a*]pyrimidines. Multinuclear magnetic resonance (^1H , ^{13}C , ^{15}N and ^{19}F) approach to their structural assignment"

Euromar 2007

Tarragona, 1-6 julio, 2007.

A. Perona, D. Sanz, R. M. Claramunt y J. Elguero.

"NMR spectroscopy studies of the behaviour of (*E*)-4-[(1*H*-benzazol-1-ylimino)methyl]pyridin-3-ol in different media"

Euromar 2007

Tarragona, 1-6 julio, 2007.

D. Santa María, R. M. Claramunt, I. Alkorta y J. Elguero.

"Fluxional behavior of molybdenum bis- and tris-pyrazolylborates"

Euromar 2007

Tarragona, 1-6 julio, 2007.

M. Pérez-Torralla, R. M. Claramunt, M. D. Santa María, A.-C. Uldry, J. Griffin, J. R. Yates, C. J. Pickard y S. P. Brown.

"Weak hydrogen bonding in 4-cyano-4'-ethynylbiphenyl by first-principles calculations and solid-state NMR spectroscopy"

5th Alpine Conference on Solid State NMR.

Chamonix-Mont Blanc (Francia), 9-13 septiembre, 2007.

C. Pérez Medina, R. M. Claramunt, C. López, J. Teichert, P. Oulié, K. Jacob, L. Vendier, M. Etienne, I. Alkorta y J. Elguero.

"Structure of fluorinated indazoles"

5th Alpine Conference on Solid State NMR.

Chamonix-Mont Blanc B (Francia), 9-13 septiembre, 2007.

J. M. López del Amo, U. Langer, G. Buntkowsky, M. Pérez-Torralla, D. Sanz, R. M. Claramunt, J. Elguero, H.-H. Limbach.

"NMR studies of ultrafast single hydrogen and deuterium tunneling in solid phase of N,N'-diphenyl-6-aminopentafulvene-1-aldimine"

5th Alpine Conference on Solid State NMR.

Chamonix-Mont Blanc (Francia), 9-13 septiembre, 2007.

M. A. García, C. López, R. M. Claramunt, E. Pinilla, M. R. Torres, I. Alkorta y J. Elguero.

"Cocrystals of 3,5-dimethyl-1*H*-pyrazole and salicylic acid: controlled formation of trimers via O-H...N hydrogen bonds"

XXXI Reunión Bienal de la RSEQ

Toledo, España, 9-14 septiembre, 2007.

M. A. Farrán, R.M. Claramunt, F. Paolucci, G. Clarkson y F. Herranz

"Synthesis and electrochemical properties of alloxazine cyclophanes: study of the influence of π - π stacking interactions"

XXXI Reunión Bienal de la RSEQ

Toledo, España, 9-14 septiembre, 2007.

D. Sanz, R. M. Claramunt, I. Alkorta and J. Elguero

"A theoretical and experimental nmr study of the tautomerism of two phenylene-bis-*c*-substituted pyrazoles"

Euromar 2008

San Petersburgo (Rusia), 6-11 julio, 2008

D. Sanz, A. Perona, R. M. Claramunt, and J. Elguero

Schiff bases of l- α -amino esters and homologues, model of the hydrogen bond structure of PLP

Euromar 2008

San Petersburgo (Rusia), 6-11 julio, 2008

P. Cornago, P. Cabildo, L. Bouissane, R. M. Claramunt and J. Elguero

“New therapeutic agents: synthesis and NMR tautomerism study of curcuminoid pyrazoles”

Euromar 2008

San Petersburgo (Rusia) 6-11 julio, 2008

L. Bouissane, M. P. Cabildo, M. P. Cornago, R. M. Claramunt, J. Elguero y C. Medina

“Synthesis and Biological Evaluation of Curcumin Pyrazoles as New Therapeutic Agents in Inflammatory Bowel Disease (IBD)”

Ninth Tetrahedron Symposium

Berkeley, CA, (USA), 22-25 julio, 2008

D. Sanz, A. Perona, R. M. Claramunt, and J. Elguero

“NMR study of Schiff bases derived of L- α -amino esters”

IV reunión Bienal del GERMN de la RSEQ / I Reunión ibérica de RMN

Sevilla, 21-24 septiembre, 2008

M. D. Santa María, R. M. Claramunt, F. Herranz, J. Elguero

“Solid state NMR study of ureas: (+)-biotin methyl ester and Gliclazide”

IV reunión Bienal del GERMN de la RSEQ / I Reunión Ibérica de RMN

Sevilla, 21-24 septiembre, 2008

M. P. Pérez-Torralla, D. Santa María, D. Sanz, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero, B. Elena, L. Emsley

“Measurement of intermolecular spin-spin coupling constants through strong hydrogen bonds (HBs) in crystals of pyridine-pyridinium tetrachlorogallate (III) [Py...H-N][GaCl₄]”

3rd. annual user meeting of EU-NMR

Autrans (Francia) 26-29 enero, 2009

R. M. Claramunt, C. López, C. Pérez-Medina, M. Pérez-Torralla, J. Elguero, G. Escames y D. Acuña

“Fluorinated Indazoles as Novel Selective Inhibitors of Nitric Oxide Synthase (NOS): Synthesis and Biological Evaluation”

Gordon Research Conference on Oxidative Stress and Disease

Il Ciocco, Lucca, Barga (Italia) 8-13 marzo, 2009

M. A. Farrán, M. A. García, M. D. Santa María, R. M. Claramunt

“Síntesis de anfitriones macrocíclicos para el reconocimiento molecular de derivados de urea y biotina”

XXXII de la Real Sociedad Española de Química.

Oviedo, 13-18 septiembre, 2009

D. Santa María, J. C. Iglesias, R. M. Claramunt.

“Reconocimiento molecular de análogos sintéticos de biotina mediante derivados de naftiridina”

XXXII de la Real Sociedad Española de Química.

Oviedo, 13-18 septiembre, 2009

R. M. Claramunt, M. Pérez Torralba, D. Santa María, D. Sanz

“Pyridine-Pyridinium Tetrachlorogallate (III) [Py...H-Py][GaCl₄]: 2h/NN, 1h/NH and 1/NH coupling constants determination”

SMASH-2009.

Chamonix (Francia), 20-23 septiembre, 2009

D. Sanz, M. A. García, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero, C. P. Frizzo, M. A. P. Martins, M. R. B. Marzari, P. T. Campos.

“Structural studies of 2-methyl-7-substituted pyrazolo[1,5-*a*] pyrimidines”

TRAMECH-09.

Hammamet (Tunez), 5-7-noviembre 2009

P. Cornago, P. Cabildo, R. M. Claramunt, J. Elguero.

“Curcuminoid pyrazoles as potential ligands at cannabinoid receptors”

TRAMECH-09.

Hammamet (Tunez), 5-7 noviembre 2009

J. C. Iglesias, D. Santa María, R. M. Claramunt

“Studies on the use of naphthyridine derivatives as effective receptors”

ECSOC-13, Section C: Bioorganic Chemistry and Natural Products

Publicado online: 1 Noviembre 2009

Rosa M. Claramunt, Dolores Santa María, M. Ángeles Farrán, M. Ángeles García, José Elguero
“New 2,5-Bisamidopyrroles in Molecular Recognition”
6th Eurasian meeting on Heterocyclic Chemistry
Alicante, 30 junio-04 julio 2010

M. A. Farrán, R. M. Claramunt, F. Paolucci, G. Accorsi, G. J. Clarkson
“Isoalloxazine-anthraquinone cyclophanes”
8th Spanish-Italian Symposium on Organic Chemistry
Padova (Italia), 3-6 julio 2010

M. A. Farrán, D. Santa María, M. A. García, R. M. Claramunt, G. J. Clarkson
“Synthesis and Binding Studies of Bisnaphthyridine Macrocycles”
8th Spanish-Italian Symposium on Organic Chemistry
Padova (Italia), 3-6 julio 2010

M. Pérez Torralba, C. Pérez-Medina, C. López, D. Sanz, R.M. Claramunt, J. Elguero, E. Pinilla
“The tautomerism of Indazolinones”
8th Spanish-Italian Symposium on Organic Chemistry
Padova (Italia), 3-6 julio 2010

M. A. García, P. Cabildo, R. M. Claramunt, E. Pinilla, M. R. Torres, I. Alkorta, J. Elguero
“The interplay of hydrogen bonds and halogen bonds in the structure of NH-pyrazoles”
8th Spanish-Italian Symposium on Organic Chemistry
Padova (Italia), 3-6 julio 2010

D. Sanz, M. A. García, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero
“Structure of primary fatty amines”
V GERMN Bienal Meeting - II Iberian NMR
Bilbao (España), 26-29 septiembre 2010

C. López, M. Pérez-Torralba, C. Pérez-Medina, R. M. Claramunt, E. Pinilla, M. R. Torres, J. Elguero
“An extraordinary fast proton transfer in solid state between two indazolinone tautomers”
V GERMN Bienal Meeting - II Iberian NMR
Bilbao (España), 26-29 septiembre 2010

D. Sanz, C. P. Frizzo, R. M. Claramunt, J. Elguero
“Biotinylated Primary Amines”
ECSOC-14
<http://www.sciforum.net/presentation/404>, 1-30 noviembre 2010

C. López, M. Bella, V. Milata, R. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero
“Nitrosubstituted 1,2-Phenylenediamines”
ECSOC-14
<http://www.sciforum.net/presentation/475>, 1-30 noviembre 2010

D. Santa María, M. Farrán, M. García, R. Claramunt
“Molecular Modeling: Prediction of the structure of Host-Guest complexes”
ECSOC-14
<http://www.sciforum.net/presentation/407>, 1-30 noviembre 2010

M. P. Cabildo, M. P. Cornago, R. M. Claramunt
“Tautomerism studies of β -Dicarbonyl compounds versus NH-Pyrazoles”
GERMN-GERM Sitges 2011
Sitges (España), 3-6 abril 2011

R. M. Claramunt, A. Farrán, M. A. García and D. Santa María
“Host-Guest Chemistry”
GERMN-GERM Sitges 2011
Sitges (España), 3-6 abril 2011

- M. Pérez-Torralba, C. Pérez-Medina, C. López, M. A. García, P. Cabildo, R. M. Claramunt
 “Solid State NMR Studies on Biologically Active Indazoles”
GERMN-GERM Sitges 2011
 Sitges (España), 3-6 abril 2011
- C. I. Nieto, M. A. García, M. A. Farrán, R. M. Claramunt, E. Pinilla, M. R. Torres, I. Alkorta and, J. Elguero
 “Towards abiotic receptors for azoles”
Twelfth Tetrahedron Symposium
 Sitges (España), 21-24 junio 2011
- M. P. Cornago, R. M. Claramunt, M. J. Mayoral, M. Cano
 “Pyridyl and pyridiniumyl β -diketones as building blocks for palladium(II) and allyl-palladium(II) isomers. Multinuclear NMR structural elucidation”
ESOC2011
 Creta (Grecia), 10-15 julio 2011
- D. Sanz, C. P. Frizzo, R. M. Claramunt, J. Elguero
 “Nuclear magnetic resonance studies on amides derived of biotin”
ESOC2011
 Creta (Grecia), 10-15 julio 2011
- M. A. Farrán, D. Santa María, M. A. García, R. M. Claramunt, G. J. Clarkson
 “Síntesis y propiedades de complejación de anfitriones macrocíclicos”
XXXIII Reunión Bienal de la RSEQ
 Valencia (España), 25-28 julio 2011
- D. Santa María, M. A. Farrán, M. A. García, R. M. Claramunt
 “Hosts for the molecular recognition of biologically active ureas”
XXXIII Reunión Bienal de la RSEQ
 Valencia (España), 25-28 julio 2011
- C. López, R. M. Claramunt, M. P. Cabildo, C. Pérez-Medina, M. C. Torralba, M. R. Torres
 “SSNMR spectroscopy and X-ray crystallography of fluorinated indazolinones”
IUCr2011
 Madrid, 22-30 Agosto 2011
- R. M. Claramunt, M. A. García, M. A. Farrán, C. I. Nieto, M. C. Torralba, M. R. Torres, I. Alkorta, J. Elguero
 “Polymorphism in 8-hydroxyquinolin-2(1H)-one by X-ray crystallography, solid state NMR and DFT calculations”
IUCr2011
 Madrid, 22-30 Agosto 2011
- R. Aggarwal, V. Kumar, A. Bansal, R. M. Claramunt, D. Sanz
 “Regiospecific formation of 6-trifluoromethyl and 4-trifluoromethyl-1H-pyrazolo[3,4-b]pyridines”
3rd International Symposium on Organofluorine Compounds in Biomedical and Agricultural Sciences
 Valencia, 20-24 Mayo 2012
- M. Pérez-Torralba, C. López, M. C. Torralba, M. R. Torres, R. M. Claramunt
 “Highly Fluorinated Benzimidazoles as Anti-inflammatory Agents”
3rd International Symposium on Organofluorine Compounds in Biomedical and Agricultural Sciences
 Valencia, 20-24 Mayo 2012
- M. A. Farrán, D. Santa María, M. A. García, R. M. Claramunt, G. J. Clarkson
 “Synthesis and Binding Studies of Bisnaphthyridine Macrocycles”
Challenges in Organic Chemistry and Chemical Biology (ISACS7)
 Edimburgo (Reino Unido), 12-15 Junio 2012
- R. M. Claramunt, C. López, M. C. Torralba, M. R. Torres, M. Pérez-Torralba
 “Benzimidazoles Fluorados como Inhibidores de la Sintasa del Óxido Nítrico (NOS)”
XXIV Reunión Bienal de Química Orgánica
 San Sebastián, 11 al 13 de julio de 2012

R. M. Claramunt, J. Z. Dávalos, F. J. González, A. Guerrero, A. Valderrama,
I. Alkorta, J. Elguero, D. Santa María
“Síntesis y estudio estructural de un nuevo complejo Cloroquina-Plata(I)”
XXIV Reunión Bienal de Química Orgánica
San Sebastián, 11 al 13 de julio de 2012

Juan Jesús López González, Juan Ramón Avilés Moreno, Francisco Partal Ureña, I. Mata, E. Molins, R. M. Claramunt, C. López, I. Alkorta, J. Elguero
“The chiral structure of 1H-indazoles in the solid state: a crystallographic, vibrational circular dichroism and computational study”
XXIII Reunión Nacional de Espectroscopia/VII Congreso Ibérico de Espectroscopia
Córdoba, 17-20 septiembre 2012

Rosa M. Claramunt, M. Pilar Cabildo, M. Pilar Cornago, Dionisia Sanz, M. Carmen Torralba, M. Rosario Torres
“New crystalline structures of β -diketones related to curcumin: X-ray and SSNMR studies”
IV Ibero-American NMR Meeting-VI GERMN Bienal Meeting-III Iberian NMR Meeting
Aveiro, Portugal, 25-28 septiembre 2012

Concepción López, Marta Pérez-Torralba, Rosa M. Claramunt, M. Carmen Torralba, M. Rosario Torres
NMR and crystallography of fluorinated benzimidazoles and benzodiazepinones
IV Ibero-American NMR Meeting-VI GERMN Bienal Meeting-III Iberian NMR Meeting
Aveiro, Portugal, 25-28 septiembre 2012

Mariana Sardo, Sérgio M. Santos, Concepción López, Ibon Alkorta, José Elguero, Rosa M. Claramunt and Luis Mafra
Structure elucidation of azole-based co-crystals using high-resolution solid-state NMR, X-ray diffraction and molecular mechanics
54th ENC conference
Pacific Grove, CA (USA) , 14-19 abril 2013

M. Pilar Cornago, Rosa M. Claramunt, Lorena Soria, Mercedes Cano, Paloma Ovejero, M. Rosario Torres
Zn and Pd pyrazole complexes as photoluminescent materials
XVth International Conference “Heterocycles in Bio-organic Chemistry”
Riga, Latvia, 27-30 mayo 2013

Rosa M. Claramunt, Concepción López, M. Carmen Torralba, M. Rosario Torres, Ibon Alkorta, José Elguero, Marta Pérez-Torralba
Synthesis and structure of fluorinated benzodiazepinones
VI Mediterranean Organic Chemistry Meeting (VI REQOMED)
Granada, 19-21 junio 2013

A. Farrán, D. Santa María, M. A. García, R. M. Claramunt, G. J. Clarkson
New Macrocycles with Naphthyridine and Carboxamide Units
VI Mediterranean Organic Chemistry Meeting (VI REQOMED)
Granada, 19-21 junio 2013

M. M. Quesada Moreno, A. Virgili, J. R. Avilés Moreno, J. J. López González, M. A. García, R. M. Claramunt, M. R. Torres, M. L. Jimeno, F. Reviriego, I. Alkorta, J. Elguero
A Spectroscopic Study of Colchicine in the Solid State and in Solution by Multinuclear Magnetic Resonance and Vibrational Circular Dichroism
14th International Conference on Chiroptical Spectroscopy
Nashville, Tennessee, USA, 9-13 junio 2013

J. R. Avilés Moreno, M. del Mar Quesada Moreno, J. J. López González, R. M. Claramunt, C. López, I. Alkorta, J. Elguero.
Chiral assembly of campho[2,3-c]pyrazole in the solid and liquid states: a vibrational circular dichroism (VCD) and computational study
14th International Conference on Chiroptical Spectroscopy
Nashville, Tennessee, USA, 9-13 junio 2013

J. R. Avilés Moreno, M. M. Quesada Moreno, J. J. López González, B. Martínez-Haya, R. M. Claramunt, C. López, I. Alkorta, J. Elguero

Self-assembly structures and chiral recognition processes: chiroptical IR-VCD response and computational study
XII Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER 2013
Sevilla, 9-11 septiembre 2013

J. J. López González, J. R. Avilés Moreno, M. M. Quesada Moreno, R. M. Claramunt, C. López, I. Alkorta, J. Elguero
Self-assembly structures of 1H-indazoles in solution and solid phases: A vibrational (IR, FarIR, Raman and VCD) and computational study
XII Iberian Meeting on Atomic and Molecular Physics IBER 2013
Sevilla, 9-11 septiembre 2013

M. P. Cabildo, P. Cornago, D. Sanz, R. M. Claramunt, J. Elguero
New Fluorinated Curcuminoids
XXXIV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Santander, 15-18 septiembre 2013

D. Santa María, R. M. Claramunt, V. Bobosik, M. C. Torralba, M. R. Torres, I. Alkorta, J. Elguero
Synthesis, computational and structural study of 2-arylbenzotriazoles related to Tinuvin
XXXIV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Santander, 15-18 septiembre 2013

M. A. García, M. Pérez-Torralba, D. Sanz, R. M. Claramunt
Solid State Fluorine NMR Studies On Bioactive Compounds
2013 SMASH NMR Conference
Santiago de Compostela, 22-25 septiembre 2013

C. Escolástico León, N. Jiménez Marsá, R. M. Claramunt Vallespi
Enseñar Ecología a través del Cine
Sixth International Conference on e-Learning and Innovative Pedagogies/Sexto Congreso Internacional de Aprendizaje y Cibersociedad
UNED, Madrid, 14-15 noviembre 2013.

J. J. López-González, M. M. Ouesada-Moreno, P. Cabildo, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero, J. R. Avilés-Moreno
Self-assembly structures of 2-propyl-1H-benzimidazole in solution and solid phases: A vibrational (IR, farIR, Raman and VCD) and computational study
XXIV RNE - VIII CIE ESPECTROSCOPIA
Logroño, 9-11 de julio de 2014

M.A. Farrán, R.M. Claramunt, G. Accorsi, G. J. Clarkson
Synthesis and Photophysical studies of anthracene-isoalloxazine bichromophoric macrocycles
10th Spanish-Italian Symposium on Organic Chemistry (SISOC-X)
Florencia (Italia), 17-20 julio 2014

M. Pérez-Torralba, O. Martín, M. A. García, R. M. Claramunt
New 1,5-Benzodiazepinones: Preparation and Multinuclear Magnetic Resonance Studies in Solution and in Solid state
10th Spanish-Italian Symposium on Organic Chemistry (SISOC-X)
Florencia (Italia), 17-20 julio 2014

R. M. Claramunt, M. Pérez-Torralba, M. A. García, C. López, M. C. Torralba, M. R. Torres, I. Alkorta, J. Elguero
Intermolecular Hydrogen and Halogen Bonds in Fluorinated Benzimidazoles
23rd Congress and General Assembly of the International Union of Crystallography (IUCR2014)
Montreal, Québec (Canada), 5-12 agosto 2014

C. I. Nieto, P. Cabildo, P. Cornago, D. Sanz, R. M. Claramunt, A. López, D. Acuña-Castroviejo
Fluorinated Curcuminoid Pyrazoles as Nitric Oxide Synthase (NOS) Inhibitors
XXIII International Symposium on Medicinal Chemistry EFMC-ISMIC 2014
Lisboa (Portugal), 7-11 septiembre 2014

L. Castañar, A. Virgili, T. Parella, R. M. Claramunt
NMR Enantiodifferentiation using ABTE as CSA and Pure Shift NMR: The case of Lamotrigine and Colchicine

- VII Biennial Meeting of the Nuclear Magnetic Resonance Group of the Spanish Royal Society of Chemistry / IV Iberian NMR Meeting / VI Ibero-American NMR Meeting
Alcalá de Henares, 22-25 septiembre 2014
- D. Sanz, C. I. Nieto, P. Cornago, P. Cabildo, R. M. Claramunt, J. Elguero
¹⁹F-NMR in solution of fluorinated hemicurcuminoids
VII Biennial Meeting of the Nuclear Magnetic Resonance Group of the Spanish Royal Society of Chemistry / IV Iberian NMR Meeting / VI Ibero-American NMR Meeting
Alcalá de Henares, 22-25 septiembre 2014
- M. A. García, A. Farrán, D. Santa María, R. M. Claramunt, C. Jaime, J. Elguero
Pyrrole-picoline and pyrrole-naphthyridine hosts for anion recognition
VII Biennial Meeting of the Nuclear Magnetic Resonance Group of the Spanish Royal Society of Chemistry / IV Iberian NMR Meeting / VI Ibero-American NMR Meeting
Alcalá de Henares, 22-25 septiembre 2014
- C. López, R. M. Claramunt, J. Elguero
Monitoring by Solid State NMR of Mechanochemical Milling Cocrystals Formation
VII Biennial Meeting of the Nuclear Magnetic Resonance Group of the Spanish Royal Society of Chemistry / IV Iberian NMR Meeting / VI Ibero-American NMR Meeting
Alcalá de Henares, 22-25 septiembre 2014
- C. Escolástico León, R. M. Claramunt Vallespí, J. Pérez-Esteban, M. Pavo López
Utilización de herramientas audiovisuales sobre tecnología IP como recurso didáctico en la asignatura Ecología
XXI Congreso Internacional de Educación y Aprendizaje
Lander Collegue for Women - Touro University New York, EEUU, 15-17 Julio 2014
- D. Santa Maria, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, M. R. Torres, I. Alkorta
SSNMR, crystallography and computational studies of 1H-benzotriazole and 5,6-dinitro-1H-benzotriazole
XXXV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ)
A Coruña, 19- 23 julio de 2015
- C. I. Nieto, P. Cabildo, P. Cornago, D. Sanz, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero
Synthesis and structural studies on trifluoromethylpyrazoles derived from hemicurcuminoids
XXXV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ)
A Coruña, 19- 23 julio de 2015
- M. M. Quesada Moreno, J. R. Avilés Moreno, J. J. López González, K. Jacob, M. Etienne, I. Alkorta, J. Elguero, R.M. Claramunt
Supramolecular organization of perfluorinated 1H-indazoles in the solid state by using vibrational spectroscopies sensitive (VCD) and non sensitive (MIR, FIR and Raman) to chirality: The case of 3-pentafluoroethyl-4,5,6,7-tetrafluoro-1H-indazole
IBER2015 (XIII Iberian Joint Meeting on Atomic and Molecular Physics)
Aveiro (Portugal), 6-9 septiembre 2015
- A. Andrade, D. Sanz, R. M. Claramunt, J. Elguero
Synthesis and Structural Characterization of 1,4-Diazepines Related to Curcumin (a044)
The 19th International Electronic Conference on Synthetic Organic Chemistry
1-30 November 2015
- R. M. Claramunt, A. Virgili, E. Monteagudo, M. M. Quesada Moreno, J. R. Avilés Moreno, J. J. López González, I. Alkorta, J. Elguero
NMR and VCD as complementary techniques to characterize chiral systems in liquid phase: the camphor case
8th GERMN/5th Iberian NMR Meeting
Valencia, 27-29 Junio 2016
- D. García-Pérez, C. López, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero
Fluorine diastereotopic signals in two N-CHF₂ derivatives of (±)-4,5,6,7-tetrahydro-7,8,8-trimethyl-4,7-methano-2H-indazole
8th GERMN/5th Iberian NMR Meeting
Valencia, 27-29 Junio 2016
- Carla I. Nieto, A. Andrade, D. Sanz, R. M. Claramunt

Reactivity of Fluorinated Hemicurcuminoids with 1,2-Ethylenediamine
6th EuChemS Chemistry Congress
Sevilla, 11-15 Septiembre 2016

J. J. López González, M. M. Queda Moreno, J. R. Avilés Moreno, K. Jacob, M. Etienne, I. Alkorta, J. Elguero, R. M. Claramunt

Supramolecular organization of perfluorinated 1H-indazoles in the solid state by using vibrational spectroscopies sensitive (VCD) and non sensitive (MIR, FIR and Raman) to chirality: The case of 3-perfluoropropyl-4,5,6,7-tetrafluoro-1H-indazole

Fifth International Conference on Vibrational Optical Activity - VOA-5
Antwerp (Belgium), 11-16, Septiembre 2016

M. Pérez-Torralba, M. A. García, R. M. Claramunt, J. Elguero
Synthesis of Fluorinated 1,5-Benzodiazepin-2-ones
Third Iberoamerican Organic Chemistry Symposium (SIBEAQO3)
Porto (Portugal), 23-25 Septiembre 2016

M. A. Farrán, R. M. Claramunt, M. R. Torres, M. C. Torralba
Synthesis of 1,4-diphenyl-5-trifluoromethyl-1,2,3-triazoles derived from J147
Third Iberoamerican Organic Chemistry Symposium (SIBEAQO3)
Porto (Portugal), 23-25 Septiembre 2016

C. I. Nieto, D. Sanz, R. M. Claramunt, M. C. Torralba, M. R. Torres
X-ray crystallography and SSNMR spectroscopy of 1,4-diazepines related to Clobazam
XXXVI Bienal de la RSEQ
Sitges, 25-29 junio 2017

M. P. Cornago, C. I. Nieto, M. P. Cabildo, R. M. Claramunt, D. Martínez Casanova, E. Escudero, J. L. Lavandera
Synthesis and Biological Evaluation of Fluorinated Curcuminoid Derivatives
XXXVI Bienal de la RSEQ
Sitges, 25-29 junio 2017

D. Sanz, R. M. Claramunt, L. Infantes, I. Alkorta, J. Elguero
The Structure of six Scorpionates. X- ray crystallography, NMR and GIAO calculations
XXXVI Bienal de la RSEQ
Sitges, 25-29 junio 2017

C. Escolástico, R. M. Claramunt, J. Pérez-Esteban
Improved Learning through Interactive Video Mini-lectures in Ecology
INTE2017- International conference on New Horizons in Education
Berlín, Alemania, 17-19 julio 2017

M. Pérez-Torralba, M. A. García, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero
Fluorinated 4-Aryl-1,5-Benzodiazepinones
SMASH 2017
Baveno, Italy, 17-20 septiembre 2017

C. Escolástico León, R. M. Claramunt Vallespí, J. Pérez-Esteban
Interactive tools as a methodological strategy for the improvement of the teaching-learning process in the subject Ecology I of the Degree in Environmental Sciences
8th World Conference on Learning, Teaching and Educational Leadership
Lisbon, Portugal, 26-28 octubre 2017

M. Pérez-Torralba, C. López, R.M. Claramunt, A. Ortiz de Zárate, I. Sánchez-Trelles, J. L. Lavandera
AOX Properties and Cytotoxicity of 1,5-Benzodiazepin-2-ones
18th Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica
Salamanca, 23-26 enero 2018

M. A. Farrán, M. A. Bonet, R. M. Claramunt, C. A. Moreno Fernández, D. Martínez Casanova, J. L. Lavandera
Cytotoxicity and Neuroprotective Effects of N,C-Diaryl-1,2,3-Triazoles
18th Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica
Salamanca, 23-26 enero 2018

D. Santa María, R. M. Claramunt, J. Elguero, M. Carda, E. Falomir, C. Martín-Beltrán
Novel 1,2,4-triazol-3-ones as anticancer agents: synthesis, NMR structural studies and biological evaluation
Italian-Spanish-Portuguese Joint Meeting in Medicinal Chemistry-MedChemSicily2018
Palermo (Italia), 17-20 julio 2018

N. de la Pinta, A. J. Cruz-Cabez, T. Brezowski, X. M. Aretxabaleta, F. J. Zúñiga, M. M. Quesada-Moreno, J. R. Avilés-Moreno, J. J. López-González, R. M. Claramunt, J. Elguero
Polymorphism in 2-propyl-1*H*-benzimidazole
31st European Crystallographic Meeting- Premio otorgado por OxfordCryosystem al mejor Póster
Oviedo (Spain), 22-27 agosto 2018

R. M. Claramunt
Panel de discusión sobre las científicas y su aportación a la Tabla Periódica
International Symposium on Setting their Table: Women and the Periodic Table of Elements
Murcia (Spain), 11-12 febrero 2019

R. M. Claramunt, C. I. Nieto, M. Marín-Luna, F. Reviriego, I. Alkorta, J. Elguero
Polymorphism and Tautomerism in crystal structures of azoles and benzazoles: SSNMR and GIPAW calculations
SMASH NMR 2019
Oporto (Portugal), 22-25 septiembre 2019

R. M. Claramunt, C. López, M. Pérez-Torralba, D. Sanz, M. Marín-Luna, F. Reviriego, I. Alkorta, J. Elguero
HALA effects on the ¹³C and ¹⁵N CPMAS NMR chemical shifts of aromatic and heteroaromatic compounds
10th GERMN - 9th Ibero American - 7th Iberian NMR Meeting
Virtual Event, 26-29 Abril 2021

Tesis Doctorales dirigidas

“Síntesis y actividad biológica de adamantil heterociclos”. D. Sanz del Castillo, Universidad Complutense de Madrid, Facultad de Ciencias Químicas, 1987. Apto Cum Laude, R. M. Claramunt Vallespí. Premio de la Fundación Universidad-Empresa a la mejor Tesis Doctoral, 1991.

“Estudio sintético, estructural y de complejación de 1,2-bisazoliletanos y 1,1,1-trisazolilalcanos”. J. L. Lavandera Díaz, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Facultad de Ciencias, 1989, Apto Cum Laude, R. M. Claramunt Vallespí.

“Nuevas drogas antichagásicas”. B. Mester Nudelman, Universidad de la República, Facultad de Química, Montevideo, Uruguay, 1990. Aprobado, R. M. Claramunt Vallespí.

“Síntesis y estudio de las propiedades físico-químicas y reactividad de poliazolilmetanos, poliazolilboratos y sus complejos metálicos con rodio e iridio”. C. López García, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Facultad de Ciencias, 1990. Apto Cum Laude, R. M. Claramunt Vallespí. Premio Extraordinario de Doctorado.

“Nuevos fotoestabilizantes UV derivados de pirazol”. M. D. Santa María Gutiérrez, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Facultad de Ciencias, 1992, Apto Cum Laude, R. M. Claramunt Vallespí.

“Cuantificación termodinámica de la acidez y basicidad por enlace de hidrogeno de disolventes orgánicos”. F. J. Gómez Pérez, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Facultad de Ciencias, 1992, Apto Cum Laude, R. M. Claramunt Vallespí.

“Estructura y reactividad de perimidinas: 2-Perimidinonas y 2-arilperimidinas”. J. Dotor García-Moreno, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Facultad de Ciencias, 1993, Apto Cum Laude, R. M. Claramunt Vallespí.

“Poliazolilbencenos: Síntesis, propiedades moleculares y supramoleculares”. C. Escolástico León, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Facultad de Ciencias, 1995, Apto Cum Laude, R. M. Claramunt Vallespí. Premio Extraordinario de Doctorado.

“Influencia de los sustituyentes en las propiedades físico-químicas y reactividad de los azoles”. J. A. Jiménez Guerrero, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Facultad de Ciencias, 2000, Apto Cum Laude, Doctorado Europeo, R. M. Claramunt Vallespí y D. Sanz del Castillo.

“Transferencias intra- e inter-moleculares de protón en sistemas conjugados”. M. Pérez Torralba, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Facultad de Ciencias, 2002, Sobresaliente Cum Laude, Doctorado Europeo, R. M. Claramunt Vallespí y D. Sanz del Castillo. Premio Extraordinario de Doctorado.

“Diseño de sólidos orgánicos mediante enlaces de hidrógeno”. M^a de los Ángeles García Fernández, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Facultad de Ciencias, 2003, Sobresaliente Cum Laude, Doctorado Europeo, R. M. Claramunt Vallespí y C. López García. Premio Extraordinario de Doctorado.

“Receptores sintéticos: estudio teórico y experimental de su interacción con ureas”. Fernando Herranz Rabanal, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Facultad de Ciencias, 2006, Sobresaliente Cum Laude, Doctorado Europeo, R. M. Claramunt Vallespí y M. D. Santa María. Premio Extraordinario de Doctorado.

“Bases de Schiff derivadas de 3-hidroxi-4-piridincarboxaldehído: Síntesis y estudio estructural”. Almudena Perona Requena, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Facultad de Ciencias, 2008, Sobresaliente Cum Laude, Doctorado Europeo, D. Sanz del Castillo y R. M. Claramunt Vallespí. Premio Extraordinario de Doctorado.

“Nuevos indazoles como inhibidores selectivos de la sintasa del óxido nítrico (NOS)”. Carlos Pérez Medina, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Facultad de Ciencias, 2008, Sobresaliente Cum Laude, C. López García y R. M. Claramunt Vallespí.

“Nuevos derivados curcuminoides: síntesis, propiedades físico-químicas y actividad biológica”. Carla Isabel Nieto Gómez, Universidad Nacional de Educación a Distancia, Facultad de Ciencias, 2018, Sobresaliente Cum Laude, Doctorado en Ciencias-Mención Internacional, Directora: R. M. Claramunt Vallespí.

DIRECCIÓN DE ESTANCIAS PREDOCTORALES

Doña Helena **Hernández Alvarado**. 1982

Doña Teresa **Meco Hernández**. 1983

Don Rafael **Garcerán Gómez**. 1985

Don José **Subirón Clapés**. 1987

Don Eduardo **Cayón i Costa**. 1988

Doña Cristina **Díaz Oliva**. 1994

Don Javier **Lafuente Pérez**. 1995

Don Javier **Marín Martín**. 1996-1997

Don Oliver **Klein**. Universidad Libre de Berlín. 1997

Doña Cristina **Fernández Castaño**. 1994-1997

Doña María Dolores **Otero del Río**. 1997-1998

Don Mariusz **Pietrzak**. Universidad de Varsovia (Polonia). 1999

Don Fernando **Herranz Rabanal**. 2000-2001

Doña Almudena **Perona Requena**. 2002-2003

Don Carlos **Pérez Medina**. 2004-2005

Doña Verónica **Torres Barthelemy**. 2004-2005

Doña Susanne **Lott**. Universidad de Freiberg (Alemania). 2004

Doña Clarissa **P. Frizzo**. Universidad de Santa María (Brasil). 2008-2009

Doña Carla **Nieto Gómez**, Universidad Autónoma de Madrid. 2010-2011

DIRECCIÓN DE ESTANCIAS POSTDOCTORALES (Con indicación de la Universidad a la que pertenecen)

Dr. Ramon **Carrasco**. Centro Nacional de Investigaciones Científicas (Cuba). 1988

Dr. Francisco **Aguilar-Parrilla**. Universidad Libre de Berlín (Alemania). Varios periodos. 1992-1998
Dr. Vlado **Bobosik**. Universidad Técnica Eslovaca de Bratislava (Eslovaquia). 1993-1994
Dr. Gerard **Boyer**. Universidad de Aix-Marsella III (Francia). 1990-1991
Dra. Isabelle **Forfar**. Universidad de Burdeos II (Francia). 1992-1994
Dr. Alejandro **Olivieri**. Universidad de Rosario (Argentina). 1993-1994
Dr. Raul **Mocelo Castell**. Universidad de La Habana (Cuba). 1994-1995
Dr. Olaf **Peters**. Universidad de Kiel (Alemania). 1996-1997
Dra. Alejandra **Ponce**. Universidad de Buenos Aires (Argentina). 1996-1997
Dra. María Araceli **Torres**. Universidad de El Salvador (El Salvador). 1996
Dr. Jairo **Quiroga**. Universidad de Cali (Colombia). 1998
Dr. Sergio Hugo **Alarcón**. Universidad de Rosario (Argentina). 1997 y 1999-2000
Dr. Viktor **Milata**. Universidad Técnica Eslovaca de Bratislava (Eslovaquia). 1999-2000
Dra. Consuelo **Escolástico León**. Becaria de la Comunidad Autónoma de Madrid. 2000
Dr. Thierry **Mas**. Universidad de Toulouse III. Becario del proyecto CAM 07N/0001. 2000- 2001
Dra. Lourdes **Infantes San Mateo**. Instituto Química Física Rocasolano, CSIC. 2001
Dra. M. Angeles **Farrán Morales**. Universidad de Bowling, USA. 2003
Dra. Marta **Pérez Torralba**. Contrato Investigadora, UNED. 2004-
Dra. M^a Ángeles **García Fernández**. Contrato de Técnico MEyC. 2005-2008
Dra. Latifa **Bouisanne**. Universidad Cadi Ayyad (Marruecos). 2006-2007
Dra. Mercedes **Blanco**. Universidad de Buenos Aires (Argentina). 2006
Dr. José Carlos **Iglesias Sánchez**. Contrato Investigador, UNED. 2009

Participación en comités y representaciones internacionales

Socia Numeraria de la RSEQ
Socia Numeraria del Grupo de Química Orgánica de la RSEQ
Socia Numeraria del Grupo de RMN de la RSEQ
Socia Numeraria del Grupo de Didáctica de la RSEQ
Socia Numeraria de la Societat Catalana de Química
Socia Numeraria de la Sociedad Española de Química Terapéutica, 1984- hasta la actualidad
Socia Numeraria de la Societé Chimique de France, 1994-2013
Socia Numeraria de la International Society of Heterocyclic Chemistry, 2000-hasta la actualidad
Socia Numeraria de la American Chemical Society, 2006-hasta la actualidad
Socia Honoraria de la Sociedad Argentina de Investigaciones en Química Orgánica (SAIQO), 1995-hasta la actualidad
Socia Numeraria de la New Swiss Chemical Society, 1993-2010
Socia Numeraria de la Sección de Química Médica de la New Swiss Chemical Society, 1993-2010

-Conferencias y Cursos-

"Síntesis de productos antiparasitarios"
III Curso de Biotoxicología, CSIC, Madrid, 1984

"Avances en la síntesis de derivados adamantilheterociclos"
Universidad Simón Bolívar de Caracas (Venezuela), 1984

“Carbon-13 NMR Determination of the Protonation Sites of Aminopyrazoles”
Queen Elizabeth College, University of London, 1985

"Nuevos heterociclos nitrogenados como fármacos potenciales"
Universidad de Alcalá de Henares (Madrid), 1985

"Parámetros utilizados en el diseño de fármacos"
Colegio Oficial de Químicos en Madrid, 1986

"Síntesis y actividad biológica de adamantilheterociclos"
III Reunión Latinoamericana de Ciencias Farmacéuticas en Montevideo (Uruguay), 1986

"Diseño de fármacos"
Facultad de Farmacia de la Universidad de Granada, 11-15 mayo 1987

"Introducción a la Química terapéutica"
Universidad de Oviedo, 1988

"Técnicas cromatográficas de separación de enantiómeros"
Centro Asociado de la UNED en Pamplona, 1988

"Metal Complexes of Polyazolylmethanes"
Prague Institute of Technology en Praga (Checoslovaquia), 30 octubre-1 noviembre 1989

"Syntheses and Reactivity of Polyazolylmethane Ligands and their Rhodium and Iridium Complexes"
Slovenska Skola Technicka of Bratislava en Bratislava (Checoslovaquia), 2-5 noviembre 1989

"Polyazolylmethanes"
Rostov University, Rostov-On-Don en Rusia, 1991

"Fotoestabilizantes o como resistir la acción de los rayos UV "
Ateneo de Madrid, 1992

"New UV Stabilizers Containing Pyrazole Units"
University College Galway Columbus Commemoration en Irlanda, 1992

"Aspectos sintéticos y conformacionales en poliazolilbencenos y poliazolilpiridinas"
X Simposio Nacional de Química Orgánica, Córdoba (Argentina), 1995

"Fotoestabilizantes UV"
Universidad de Castilla la Mancha, Ciudad Real, 1997

“Report on the Progresses Made in Proton Transfer and Tautomerism”
Freie Universität Berlin, Berlin (Alemania), 1998

“Polyazolylbenzenes and Related Compounds: Propellene-Like Aromatic Compounds”
Institut für Organische Chemie, Technische Universität Bergakademie Freiberg, Freiberg (Alemania), 1998

“La RMN en estado sólido como auxiliar de la cristalografía”
Parque Científico de Barcelona, Barcelona, 2000

“Fonaments de la indústria alimentària”
UNED-Terrassa, Terrassa, 2000

“Control analític en la indústria alimentaria”
UNED-Terrassa, Terrassa, 2001

“Química i bioquímica dels aliments”
UNED-Terrassa, Terrassa, 2002

“Aspectes bàsics en la seguretat alimentaria”
UNED-Terrassa, Terrassa, 2002

“Hydrogen transfer and bonding in heterocyclic systems”
2nd Transmediterranean Colloquium on Heterocyclic Chemistry, Bari, Italia, 2002

“Dones i ciència”

Centro Asociado UNED Illes Balears, Palma de Mallorca, 2002

“Mujeres en ciencias”

Centro Asociado UNED Navalmoral de la Mata, 2002

“NMR and crystallography”

Faculté des Sciences de Luminy, Département de Chimie, Marsella (Francia), diciembre 2003

“Aplicaciones químicas de la RMN CPMAS”

Universidad Federal Rural do Rio de Janeiro, Departamento de Química, Rio de Janeiro (Brasil), febrero 2004

“Enlace de hidrógeno en química heterocíclica”

Universidad Federal de Santa María, Departamento de Química, Santa María, RS (Brasil), febrero 2004

“Mujeres y Ciencia”

Acto de San Alberto Magno, Universidad de Alcalá de Henares, 2004

“Reconocimiento Molecular en Estado Sólido” (8 horas)

En el marco del Curso de Química Supramolecular del Programa de Doctorado de Calidad de Química Orgánica Universidad Complutense de Madrid. Madrid, Abril-Mayo 2004

“An approach to the properties of organic solids”

Journée de la Federation des Sciences Chimiques et de l'École Doctorale de Marseille, Campus Universitaire de Saint Jérôme. Marsella (Francia), junio 2004

“Estudio de sólidos orgánicos”

Universidad de Almería, Almería, Mayo 2005

“Reconocimiento Molecular en Estado Sólido” (8 horas)

En el marco del Curso de Química Supramolecular del Programa de Doctorado de Calidad de Química Orgánica Universidad Complutense de Madrid. Madrid, Abril-Mayo 2005

“Host-Guest Complexes”

Freie Universität Berlin, Berlin (Alemania), Julio 2005

“Origen y Evolución de la Ecología”

XV Aula de Ecología, Centro Asociado de la UNED, Almería, Noviembre 2005

“Reconocimiento Molecular en Estado Sólido” (8 horas)

En el marco del Curso de Química Supramolecular del Programa de Doctorado de Calidad de Química Orgánica Universidad Complutense de Madrid, Madrid, Abril-Mayo 2006

“The use of NMR spectroscopy to study tautomerism”

III Biental del Grupo Especializado de Resonancia Magnética Nuclear (GERMN) Sant Joan (Alicante), Octubre, 2006

“Polimorfismo y Quiralidad”

XI Semana Científica Antonio González

Universidad de La Laguna, La Laguna, Octubre 2007

“Ecología, ¿algo más de un siglo de vida?”

Curso sobre Conservación y Protección del Medio Ambiente.

C. A. de les Illes Balears, UNED, 2008

“Mujer y Universidad”

Mesa redonda en relación con la exposición Protagonistas en la Sombra SECC/UNED, Bruselas, Junio 2010

“Pyrazoles and Indazoles as Drugs”

6th Eurasian Meeting on Heterocyclic Chemistry

Universitat d'Alacant, Julio 2010

“La Mujer en la Ciencia y Tecnología Química”

Facultad de Ciencias UNED

Madrid, 20 Mayo 2011

“Química i Salut”
Cicle de Conferències de Química al mNACTEC 2011
Terrassa, 30 Novembre 2011

“Sistemas Supramoleculares Bioorgánicos”
II Workshop UFI-QOSYC
Universidad del País Vasco
Bilbao, 26 Abril 2013

"RMN y Cristalografía de Sólidos Orgánicos"
Curso Resonancia Magnética Nuclear en estado sólido
Instituto de Cerámica y Vidrio
CSIC-Ministerio de Economía y Competitividad
Madrid 27-29 Octubre 2014

"Mujeres en Ciencia"
San Alberte 2018 A Muller na Ciencia
Universidade de Vigo
Vigo, 15 Noviembre 2018

"Mujeres Científicas en España"
El papel de la mujer española en el momento actual
Ateneo de Madrid
Madrid, 21 Mayo 2019

-Otros-

Vocal de la Junta de Gobierno de la RSEQ, 1995-1998

Miembro de la Comisión de Dirección de la Revista Anales de Química, 1999-2000

Miembro del Comité Asesor Internacional de la Revista Anales de la Asociación Química Argentina

Miembro del Consejo de Redacción de la Revista 100CIAS@UNED, 1997- 2015

Vocal representante de Catedráticos de Universidad en la Junta de Gobierno de la UNED, 1993-1995

Consejera representante de Directores de Departamento en Consejo de Gobierno de la UNED, 2007-2010

Vocal de la Junta de la Facultad de Ciencias de la UNED, 1986- 2015

Miembro del Claustro de la UNED, 1981- 2014

Miembro del Comité Científico de las II Jornadas de Percepción Sensorial, Barcelona 2004

Dirección de la XV Aula de Ecología, Centro Asociado de la UNED, Almería, 2005

Vocal del Real Patronato de la Biblioteca Nacional, 10/02/2006 a 9/02/2009

Miembro del Comité de Lecture del Journal Marocain de Chimie Heterocyclique, 2002-hasta la actualidad

Miembro del Scientific Advisory Board de la revista Scientia Pharmaceutica, 2010-hasta la actualidad

Miembro de la European Academy of Sciences and Arts, 9/01/2013- hasta la actualidad

Vocal de la Sección Territorial de Madrid de la RSEQ, 2014-2020

Directora de la Revista 100CIAS@UNED, 2016-2020