

INSTITUTE OF CHEMICAL SCIENCES

PUBLICATIONS 2016

1. A. A. Wiles, X. L. Zhang, B. Fitzpatrick, D. L. Long, S. A. Macgregor and G. Cooke, *Dalton Trans.*, 2016, **45**, 7220-7225.
2. A. Cassidy, M. R. V. Jorgensen, A. Rosu-Finsen, J. Lasne, J. H. Jorgensen, A. Glavic, V. Lauter, B. B. Iversen, M. R. S. McCoustra and D. Field, *J. Phys. Chem. C*, 2016, **120**, 24130-24136.
3. A. Gupta and N. R. Leslie, *J. Biol. Chem.*, 2016, **291**, 18465-18473.
4. A. Gupta, H. Maccario, N. Kriplani and N. R. Leslie, in *Pten: Methods and Protocols*, eds. L. Salmena and V. Stambolic, Humana Press Inc, Totowa, 2016, DOI: 10.1007/978-1-4939-3299-3_11, pp. 155-165.
5. A. Hardy and H. Bock, *J. Phys. Chem. B*, 2016, **120**, 11607-11617.
6. A. Kumar, N. A. Beattie, S. D. Pike, S. A. Macgregor and A. S. Weller, *Angew. Chem.-Int. Edit.*, 2016, **55**, 6651-6656.
7. A. L. Lee, *Org. Biomol. Chem.*, 2016, **14**, 5357-5366.
8. A. L. Lee, *Nat. Chem.*, 2016, **8**, 8-9.
9. A. Miguelez, R. Duncan and E. Brown, *Faseb J.*, 2016, **30**, 2.
10. A. P. M. Robertson, N. A. Beattie, G. Scott, W. Y. Man, J. J. Jones, S. A. Macgregor, G. M. Rosair and A. J. Welch, *Angew. Chem.-Int. Edit.*, 2016, **55**, 8706-8710.
11. A. Rosu-Finsen, D. Marchione, T. L. Salter, J. W. Stubbing, W. A. Brown and M. R. S. McCoustra, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, **18**, 31930-31935.
12. A. Rosu-Finsen, J. Lasne, A. Cassidy, M. R. S. McCoustra and D. Field, *Astrophys. J.*, 2016, **832**, 6.
13. A. Rosu-Finsen, J. Lasne, A. Cassidy, M. R. S. McCoustra and D. Field, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, **18**, 5159-5171.
14. A. Sanna, J. Gaubert and M. M. Maroto-Valer, *Chem. Eng. J.*, 2016, **306**, 1049-1057.
15. A. Sanna and M. M. Maroto-Valer, *Environ. Sci. Pollut. Res.*, 2016, **23**, 22242-22252.
16. A. Sanna and M. M. Maroto-Valer, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 2016, **55**, 4080-4088.
17. A. Szumna and S. J. Dalgarno, *Crystengcomm*, 2016, **18**, 4887-4889.
18. B. C. Marshall, E. J. Smoll, S. M. Purcell, M. L. Costen, K. G. McKendrick and T. K. Minton, *J. Phys. Chem. C*, 2016, **120**, 12472-12483.
19. C. R. Pfeiffer, K. A. Feaster, S. J. Dalgarno and J. L. Atwood, *Crystengcomm*, 2016, **18**, 222-229.
20. C. W. Lin, M. Nazeri, A. Bhattacharji, G. Spicer and M. M. Maroto-Valer, *Appl. Energy*, 2016, **165**, 759-764.
21. D.G. Bucknall, J. Czernuszk, J Lee, Z Radzi, M Swan, Tissue expander. US Patent 09375512, issued Jun 28 2016.
22. D. G. Stark, P. Williamson, E. R. Gayner, S. F. Musolino, R. W. F. Kerr, J. E. Taylor, A. M. Z. Slawin, T. J. C. O'Riordan, S. A. Macgregor and A. D. Smith, *Org. Biomol. Chem.*, 2016, **14**, 8957-8965.
23. D. J. Hadden, T. M. Messider, J. G. Leng and S. J. Greaves, *Rev. Sci. Instrum.*, 2016, **87**, 3.
24. D. Mandal, W. Y. Man, G. M. Rosair and A. J. Welch, *Dalton Trans.*, 2016, **45**, 15013-15025.
25. D. Marchione and M. R. S. McCoustra, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, **18**, 29747-29755.
26. D. Marchione and M. R. S. McCoustra, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, **18**, 20790-20801.
27. D. Marchione, J. D. Thrower and M. R. S. McCoustra, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, **18**, 4026-4034.
28. D. R. Adams, S. Pyne and N. J. Pyne, *Trends Biochem.Sci.*, 2016, **41**, 395-409.
29. D. Sharma, W. M. C. Sameera, S. Andersson, G. Nyman and M. J. Paterson, *ChemPhysChem*, 2016, **17**, 4079-4089.

30. D. W. Li, H. Xu, L. Zhang, D. Y. C. Leung, F. Vilela, H. Z. Wang and J. Xuan, *Int. J. Hydrog. Energy*, 2016, **41**, 10249-10254.
31. F. M. Chadwick, T. Kramer, T. Gutmann, N. H. Rees, A. L. Thompson, A. J. Edwards, G. Buntkowsky, S. A. Macgregor and A. S. Weller, *J. Am. Chem. Soc.*, 2016, **138**, 13369-13378.
32. F. M. Chadwick, N. H. Rees, A. S. Weller, T. Kramer, M. Iannuzzi and S. A. Macgregor, *Angew. Chem. Int. Edit.*, 2016, **55**, 3677-3681.
33. F. Vega, A. Sanna, M. M. Maroto-Valer, B. Navarrete and D. Abad-Correa, *Int. J. Greenh. Gas Control*, 2016, **54**, 160-167.
34. G. Bernardo, N. Deb, S. M. King and D. G. Bucknall, *J. Polym. Sci. Pt. B-Polym. Phys.*, 2016, **54**, 994-1001.
35. G. Han, S. R. Popuri, H. F. Greer, J. W. G. Bos, W. Z. Zhou, A. R. Knox, A. Montecucco, J. Siviter, E. A. Man, M. Macauley, D. J. Paul, W. G. Li, M. C. Paul, M. Gao, T. Sweet, R. Freer, F. Azough, H. Baig, N. Sellami, T. K. Mallick and D. H. Gregory, *Angew. Chem.-Int. Edit.*, 2016, **55**, 6433-6437.
36. G. M. M. Caro, Y. J. Chen, S. Aparicio, A. Jimenez-Escobar, A. Rosu-Finsen, J. Lasne and M. R. S. McCoustra, *Astron. Astrophys.*, 2016, **589**, 7.
37. G. S. Kazakov, I. B. Sivaev, K. Yu. Suponitsky, A. D. Kirilin, V. I. Bregadze and A. J. Welch, *J. Organomet. Chem.*, 2016, **805**, 1-5.
38. H. Al-Kalbani, J. Xuan, S. Garcia and H. Z. Wang, *Appl. Energy*, 2016, **165**, 1-13.
39. H. McLachlan and X. W. Ni, *J. Cryst. Growth*, 2016, **442**, 81-88.
40. H. McLachlan and X. W. Ni, *Chem. Eng. Commun.*, 2016, **203**, 1189-1197.
41. I. Gyongy, N. Calder, A. Davies, N. A. W. Dutton, P. Dalgarno, R. Duncan, C. Rickman, R. K. Henderson and I. Lee, in *2016 IEEE International Electron Devices Meeting*, IEEE, New York, 2016.
42. I. Gyongy, A. Davies, N. A. W. Dutton, R. R. Duncan, C. Rickman, R. K. Henderson and P. A. Dalgarno, *Sci Rep*, 2016, **6**, 10.
43. I. Loa, J. W. G. Bos, R. A. Downie and K. Syassen, *Phys. Rev. B*, 2016, **93**, 8.
44. I. M. Riddlestone, D. McKay, M. J. Gutmann, S. A. Macgregor, M. F. Mahon, H. A. Sparkes and M. K. Whittlesey, *Organometallics*, 2016, **35**, 1301-1312.
45. I. M. Riddlestone, N. A. Rajabi, J. P. Lowe, M. F. Mahon, S. A. Macgregor and M. K. Whittlesey, *J. Am. Chem. Soc.*, 2016, **138**, 11081-11084.
46. I. Schlangen, J. Franco, J. Houssineau, W. T. E. Pitkeathly, D. Clark, I. Smal and C. Rickman, *IEEE J. Sel. Top. Signal Process.*, 2016, **10**, 193-202.
47. J. A. Aelakund and X. Ni, *the International Journal of Engineering Research and Science*, Vol. 2, No. 10, 2016, p1-12.
48. J. C. Denis, A. Ruseckas, G. J. Hedley, A. B. Matheson, M. J. Paterson, G. A. Turnbull, I. D. W. Samuel and I. Galbraith, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, **18**, 21937-21948.
49. J. Cols, C. E. Taylor, K. J. Gagnon, S. J. Teat and R. D. McIntosh, *Dalton Trans.*, 2016, **45**, 17729-17738.
50. J. D. Ryan, K. J. Gagnon, S. J. Teat and R. D. McIntosh, *Chem. Commun.*, 2016, **52**, 9071-9073.
51. J. M. Tobin, J. Liu, H. Hayes, M. Demleitner, D. Ellis, V. Arrighi, Z. Xu and F. Vilela, *Polym. Chem.*, 2016, **7**, 6662-6670.
52. J. O. F. Thompson, L. B. Klein, T. I. Solling, M. J. Paterson and D. Townsend, *Chem. Sci.*, 2016, **7**, 1826-1839.
53. J. P. Coe and M. J. Paterson, *Int. J. Quantum Chem.*, 2016, **116**, 1772-1782.
54. J. P. Coe and M. J. Paterson, *Chem. Phys. Lett.*, 2016, **645**, 106-111.
55. J. Shen, S. Gagliardi, M. R. S. McCoustra and V. Arrighi, *Chemosphere*, 2016, **159**, 66-71.
56. J. Shen, R. Steinbach, J. M. Tobin, M. M. Nakata, M. Bower, M. R. S. McCoustra, H. Bridle, V. Arrighi and F. Vilela, *Appl. Catal. B-Environ.*, 2016, **193**, 226-233.
57. J. Wildman, P. Repiscak, M. J. Paterson and I. Galbraith, *J. Chem. Theory Comput.*, 2016, **12**, 3813-3824.

58. K. Cialowicz, R. Duncan, C. Rickman, E. Brown and M. Euston, *Faseb J.*, 2016, **30**, 2.
59. K. J. T. Carr, S. A. Macgregor and C. L. McMullin, in *C-H Bond Activation and Catalytic Functionalization I*, eds. P. H. Dixneuf and H. Doucet, Springer-Verlag Berlin, Berlin, 2016, vol. 55, pp. 53-76.
60. L. B. Klein, J. O. F. Thompson, S. W. Crane, L. Saalbach, T. I. Solling, M. J. Paterson and D. Townsend, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, **18**, 25070-25079.
61. L. B. Klein, T. J. Morsing, R. A. Livingstone, D. Townsend and T. I. Solling, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2016, **18**, 9715-9723.
62. L.C. Cosarsonas, R.Rustum and S. García, 2016, *Modern Environmental Science and Engineering*, 2(7), 445-453.
63. L. E. Riley, A. P. Y. Chan, J. Taylor, W. Y. Man, D. Ellis, G. M. Rosair, A. J. Welch and I. B. Sivaev, *Dalton Trans.*, 2016, **45**, 1127-1137.
64. L. Perrin, K. J. T. Carr, D. McKay, C. L. McMullin, S. A. Macgregor and O. Eisenstein, in *Computational Studies in Organometallic Chemistry*, eds. S. A. Macgregor and O. Eisenstein, Springer Int Publishing Ag, Cham, 2016, vol. 167, pp. 1-37.
65. L. R. Collins, N. A. Rajabi, S. A. Macgregor, M. F. Mahon and M. K. Whittlesey, *Angew. Chem.-Int. Edit.*, 2016, **55**, 15539-15543.
66. L. Spinelli and N. R. Leslie, in *Protein Tyrosine Phosphatases: Methods and Protocols*, ed. R. Pulido, Humana Press Inc, Totowa, 2016, vol. 1447, pp. 95-105.
67. L. Steel, Q. Liu, E. Mackay and M. M. Maroto-Valer, *Greenh. Gases*, 2016, **6**, 197-217.
68. M. Asaad, J. Buckman, R. I. Smith and J. W. G. Bos, *RSC Adv.*, 2016, **6**, 56511-56517.
69. M. A. Tesa-Serrate, E. J. Smoll, L. D'Andrea, S. M. Purcell, M. L. Costen, D. W. Bruce, J. M. Slattery, T. K. Minton and K. G. McKendrick, *J. Phys. Chem. C*, 2016, **120**, 27369-27379.
70. M. A. Tesa-Serrate, E. J. Smoll, T. K. Minton and K. G. McKendrick, in *Annual Review of Physical Chemistry, Vol 67*, eds. M. A. Johnson and T. J. Martinez, Annual Reviews, Palo Alto, 2016, vol. 67, pp. 515-540.
71. M. Coletta, R. McLellan, J. M. Cols, K. J. Gagnon, S. J. Teat, E. K. Brechin and S. J. Dalgarno, *Supramol. Chem.*, 2016, **28**, 557-566.
72. M. Coletta, R. McLellan, A. Waddington, S. Sanz, K. J. Gagnon, S. J. Teat, E. K. Brechin and S. J. Dalgarno, *Chem. Commun.*, 2016, **52**, 14246-14249.
73. M. Coletta, R. McLellan, P. Murphy, B. T. Leube, S. Sanz, R. Clowes, K. J. Gagnon, S. J. Teat, A. I. Cooper, M. J. Paterson, E. K. Brechin and S. J. Dalgarno, *Chem.-Eur. J.*, 2016, **22**, 8791-8795.
74. M. J. Broadhead, M. H. Horrocks, F. Zhu, L. Muresan, R. Benavides-Piccione, J. DeFelipe, D. Fricker, M. V. Kopanitsa, R. R. Duncan, D. Klenerman, N. H. Komiyama, S. F. Lee and S. G. N. Grant, *Sci Rep*, 2016, **6**, 14.
75. M. M. Maroto-Valer, *Greenh. Gases*, 2016, **6**, 161-162.
76. M. M. Zawadzki, M. Candelaresi, L. Saalbach, S. W. Crane, M. J. Paterson and D. Townsend, *Faraday Discuss.*, 2016, **194**, 185-208.
77. M. Mujahid, N. Trendafilova, A. F. Arfa-Kia, G. Rosair, K. Kavanagh, M. Devereux, M. Walsh, S. McClean, B. S. Creaven and I. Georgieva, *J. Inorg. Biochem.*, 2016, **163**, 53-67.
78. M. Nazeri, M. M. Maroto-Valer and E. Jukes, *Int. J. Greenh. Gas Control*, 2016, **54**, 297-308.
79. M. Rosello-Merino and S. M. Mansell, *Dalton Trans.*, 2016, **45**, 6282-6293.
80. M. Rumayor, M. A. Lopez-Anton, M. Diaz-Somoano, M. M. Maroto-Valer, J. H. Richard, H. Biester and M. R. Martinez-Tarazona, *Talanta*, 2016, **150**, 272-277.
81. M. Schafer, N. A. Beattie, K. Geetharani, J. Schafer, W. C. Ewing, M. Krahfuss, C. Horl, R. D. Dewhurst, S. A. Macgregor, C. Lambert and H. Braunschweig, *J. Am. Chem. Soc.*, 2016, **138**, 8212-8220.
82. N. Alvarez-Gutierrez, S. Garcia, M. V. Gil, F. Rubiera and C. Pevida, *Energy Fuels*, 2016, **30**, 5005-5015.
83. N. A. Willoughby, H. Bock, M. A. Hoeve, S. Pells, C. Williams, G. McPhee, P. Freile, D. Choudhury and P. A. De Sousa, *Biomicrofluidics*, 2016, **10**, 16.

84. N. Deb, B. H. Li, M. Skoda, S. Rogers, Y. Sun, X. Gong, A. Karim, B. G. Sumpter and D. G. Bucknall, *Adv. Funct. Mater.*, 2016, **26**, 1908-1920.
85. N. M. S. Almeida, R. G. McKinlay and M. J. Paterson, in *Computational Studies in Organometallic Chemistry*, eds. S. A. Macgregor and O. Eisenstein, Springer Int Publishing Ag, Cham, 2016, vol. 167, pp. 107-138.
86. N. R. Leslie, N. Kriplani, M. A. Hermida, V. Alvarez-Garcia and H. M. Wise, *Biochem. Soc. Trans.*, 2016, **44**, 273-278.
87. N. R. Leslie and M. Longy, *Semin. Cell Dev. Biol.*, 2016, **52**, 30-38.
88. O. Ola and M. M. Maroto-Valer, *Chem. Eng. J.*, 2016, **283**, 1244-1253.
89. P. Cordoba, M. Maroto-Valer, M. A. Delgado, R. Diego, O. Font and X. Querol, *Environ. Res.*, 2016, **150**, 665-665.
90. P. Cordoba, M. Maroto-Valer, M. A. Delgado, R. Diego, O. Font and X. Querol, *Environ. Res.*, 2016, **145**, 154-161.
91. P. Cordoba, Q. Liu, S. Garcia and M. Maroto-Valera, *J. CO2 Util.*, 2016, **16**, 78-85.
92. P. Murphy, S. J. Dalgarno and M. J. Paterson, *J. Phys. Chem. A*, 2016, **120**, 824-839.
93. R. H. Mei, H. Wang, S. Warratz, S. A. Macgregor and L. Ackermann, *Chem.-Eur. J.*, 2016, **22**, 6759-6763.
94. R. Porrazzo, G. White and R. Ocone, *Fuel*, 2016, **175**, 87-98.
95. R. Porrazzo, G. White and R. Ocone, *Faraday Discuss.*, 2016, **192**, 437-457.
96. R. S. Wilson, L. Yang, A. Dun, A. M. Smyth, R. R. Duncan, C. Rickman and W. P. Lu, *R. Soc. Open Sci.*, 2016, **3**, 13.
97. S. A. Macgregor and O. Eisenstein, in *Computational Studies in Organometallic Chemistry*, eds. S. A. Macgregor and O. Eisenstein, Springer Int Publishing Ag, Cham, 2016, vol. 167, pp. V.
98. S. E. Greenough, M. D. Horbury, N. A. Smith, P. J. Sadler, M. J. Paterson and V. G. Stavros, *ChemPhysChem*, 2016, **17**, 221-224.
99. S. Gomez-Quero, F. Cardenas-Lizana and M. A. Keane, *React. Kinet. Mech. Catal.*, 2016, **119**, 35-48.
100. S. I. Jenkins, D. Weinberg, A. F. al-Shakli, A. R. Fernandes, H. H. P. Yiu, N. D. Telling, P. Roach and D. M. Chari, *J. Control. Release*, 2016, **224**, 136-145.
101. S. L. Benjamin, T. Kramer, W. Levason, M. E. Light, S. A. Macgregor and G. Reid, *J. Am. Chem. Soc.*, 2016, **138**, 6964-6967.
102. S. Li, L. J. Yang, O. Ola, M. Maroto-Valer, X. Z. Du and Y. P. Yang, *Energy Conv. Manag.*, 2016, **116**, 184-193.
103. S. L. Ling and M. Gutowski, *J. Phys. Chem. A*, 2016, **120**, 8199-8210.
104. S. L. Powley, G. M. Rosair and A. J. Welch, *Dalton Trans.*, 2016, **45**, 11742-11752.
105. S. L. Powley, L. Schaefer, W. Y. Man, D. Ellis, G. M. Rosair and A. J. Welch, *Dalton Trans.*, 2016, **45**, 3635-3647.
106. S. M. Mansell and P. L. Arnold, *Polyhedron*, 2016, **116**, 82-87.
107. S. M. Mansell and S. T. Liddle, *Inorganics*, 2016, **4**, 3.
108. S. M. Purcell, M. A. Tesa-Serrate, B. C. Marshall, D. W. Bruce, L. D'Andrea, M. L. Costen, J. M. Slattery, E. J. Smoll, T. K. Minton and K. G. McKendrick, *Langmuir*, 2016, **32**, 9938-9949.
109. S. Pyne, D. R. Adams and N. J. Pyne, *Prog. Lipid Res.*, 2016, **62**, 93-106.
110. S. R. Popuri and J. W. G. Bos, *MRS Adv.*, 2016, **1**, 3997-4002.
111. S. R. Popuri, M. Pollet, R. Decourt, F. D. Morrison, N. S. Bennett and J. W. G. Bos, *J. Mater. Chem. C*, 2016, **4**, 1685-1691.
112. S. W. Crane, M. M. Zawadzki, J. O. F. Thompson, N. Kotsina, O. Ghafur and D. Townsend, *J. Chem. Phys.*, 2016, **145**, 10.
113. S. Webster, D. R. Sutherland and A. L. Lee, *Chem.-Eur. J.*, 2016, **22**, 18593-18600.
114. T. Aysu, M. M. Maroto-Valer and A. Sanna, *Bioresour. Technol.*, 2016, **208**, 140-148.

115. T. F. M. Luxford, T. R. Sharples, K. G. McKendrick and M. L. Costen, *J. Chem. Phys.*, 2016, **145**, 174304.
116. T. F. M. Luxford, T. R. Sharples, D. Townsend, K. G. McKendrick and M. L. Costen, *J. Chem. Phys.*, 2016, **145**, 084312.
117. T. N. Hooper, A. S. Weller, N. A. Beattie and S. A. Macgregor, *Chem. Sci.*, 2016, **7**, 2414-2426.
118. V. Gauchot and A. L. Lee, *Chem. Commun.*, 2016, **52**, 10163-10166.
119. W. Y. Man, D. Ellis, G. M. Rosair and A. J. Welch, *Angew. Chem.-Int. Edit.*, 2016, **55**, 4596-4599.
120. X. D. Wang and H. H. P. Yiu, *ACS Catal.*, 2016, **6**, 1880-1886.
121. X. D. Wang, Y. F. Hao and M. A. Keane, *Appl. Catal. A-Gen.*, 2016, **510**, 171-179.
122. X. D. Wang, N. Perret, L. Delannoy, C. Louis and M. A. Keane, *Catal. Sci. Technol.*, 2016, **6**, 6932-6941.
123. X. Lu, D. Y. C. Leung, H. Z. Wang, M. M. Maroto-Valer and J. Xuan, *Renew. Energy*, 2016, **95**, 277-285.
124. Y. F. Hao, M. S. Li, F. Cardenas-Lizana and M. A. Keane, *Catal. Lett.*, 2016, **146**, 109-116.
125. Y. Jiang, Z. Qiu, R. McPhillips, C. Meggs, S. O. Mahboob, H. Wang, R. Duncan, D. Rodriguez-Sanmartin, Y. Zhang, G. Schiavone, R. Eisma, M. P. Y. Desmulliez, S. Eljamel, S. Cochran, T. W. Button and C. E. M. Demore, *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control*, 2016, **63**, 233-244.
126. Y. L. Wong, J. M. Tobin, Z. Xu and F. Vilela, *J. Mater. Chem. A*, 2016, **4**, 18677-18686.
127. Y. M. Mao, R. M. Kriegel and D. G. Bucknall, *Polymer*, 2016, **102**, 308-314.
128. Z. Qiu, R. S. Wilson, Y. W. Liu, A. R. Dun, R. S. Saleeb, D. S. Liu, C. Rickman, M. Frame, R. R. Duncan and W. P. Lu, *Sci Rep*, 2016, **6**, 10.
129. Z. Zhang, V. Arrighi, L. Campbell, J. Lonchamp and S. R. Euston, *Food Hydrocolloids*, 2016, **56**, 218-226.
130. Z. Zhang, V. Arrighi, L. Campbell, J. Lonchamp and S. R. Euston, *Food Hydrocolloids*, 2016, **52**, 95-105.