

Tesis Dirigides, Treballs d'Investigació, Treballs de Màster o de Tercer Cicle Dirigits

- 1- **Codi:** 017951 **Clau:** Tesi Doctoral (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO*)
Any: 2011 **Títol:** Análisis molecular integral del glioblastoma multiforme. Caracterización genómica, transcriptómica y metabolómica con tecnologías masivas de alto rendimiento molecular
Autor: Ruben Ferrer Luna **Director:** Bernardo Celda Muñoz, Concepción López Ginés, Miguel Cerdá Nicolás **Qualificació:** Excel·lent cum laude
Classificació: Tesis doctoral Excelent Cum Laude

- 2- **Codi:** 016250 **Clau:** Tesi Doctoral (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2011 **Títol:** Estudio teórico de la hidrólisis de ésteres fosfato catalizada por la superfamilia de la Fosfatasa Alcalina. Análisis de la promiscuidad enzimática
Autor: Violeta López Canut **Director:** Iñaki Tuñón y Vicente Moliner **Qualificació:** Excel·lent cum laude
Classificació: Tesis doctoral Excelent Cum Laude



Articles en Revistes

- 1- Codi: 062124 Clau: Article (AULLO I REVERTE, JOSEP MARIA; PIQUERAS GARCIA, CARMEN; CRESPO CRESPO, RAUL)
Any: 2011 Autors: R. CRESPO, M.C. PIQUERAS, J. M. AULLO, O. TAPIA
Títol: A Theoretical study of semiclassical models: toward a quantum mechanical representation of chemical processes
Revista: 900829 - International Journal of Quantum Chemistry
Informació addicional: Volum: 111 Número: 2 Pàgina inicial: 263 Pàgina final: 271 Data de publicació: 2011
Classificació: Article ISI al 2on quartil

- 2- Codi: 077078 Clau: Article (CELDA MUÑOZ, BERNARDO)
Any: 2011 Autors: Martínez-Granados B, Morales JM, Rodrigo JM, Del Olmo J, Serra MA, Ferrández A, Celda B, Monleón D.
Títol: Metabolic profile of chronic liver disease by NMR spectroscopy of human biopsies
Revista: 909960 - International Journal of Molecular Medicine
Informació addicional: Volum: 27(1) Número: Pàgina inicial: 111 Pàgina final: 117 Data de publicació: 2011
Classificació: Article ISI al 3er quartil

- 3- Codi: 077079 Clau: Article (CELDA MUÑOZ, BERNARDO)
Any: 2011 Autors: Ferrer-Luna R, Núñez L, Piquer J, Arias E, Dasí F, Cervio A, Arakaki N, Sevlever G, Celda B, Martinetto H.
Títol: Whole-genomic survey of oligodendroglial tumors: correlation between allelic imbalances and gene expression profiles
Revista: 303603 - Journal of Neurooncology
Informació addicional: Volum: 103(1) Número: Pàgina inicial: 71 Pàgina final: 85 Data de publicació: 05/2011
Classificació: Article Àmbit Internacional

- 4- Codi: 077080 Clau: Article (CELDA MUÑOZ, BERNARDO)
Any: 2011 Autors: Croitor Sava A, Martínez-Bisbal MC, Van Huffel S, Cerda JM, Sima DM, Celda B.
Títol: Ex vivo high resolution magic angle spinning metabolic profiles describe intratumoral histopathological tissue properties in adult human gliomas.
Revista: 905567 - Magnetic Resonance in Medicine
Informació addicional: Volum: 65(2) Número: Pàgina inicial: 320 Pàgina final: 328 Data de publicació: 02/2011
Classificació: Article ISI al 1er quartil

- 5- Codi: 074544 Clau: Article (CELDA MUÑOZ, BERNARDO; MARTINEZ BISBAL, MARIA CARMEN)
Any: 2011 Autors: S. Tortajada; E. Fuster-Garcia; J. Vicente; P. Wesseling; F.A. Howe; M. Julià-Sapé; A.P. Candiota; D. Monleón; A. Moreno-Torres; J. Pujol; J.R. Griffiths; A. Wright; A.C. Peet; M.C. Martínez-Bisbal; B. Celda; C. Arús; M. Robles; J.M. García-Gómez
Títol: Incremental Gaussian Discriminant Analysis based on Graybill and Deal weighted combination of estimators for brain tumour diagnosis
Revista: 910887 - Journal of Biomedical Informatics
Informació addicional: Volum: 44 Número: 4 Pàgina inicial: 677 Pàgina final: 687 Data de publicació: 04/03/2011
Classificació: Article ISI al 2on quartil

- 6- Codi: 074545 Clau: Article (CELDA MUÑOZ, BERNARDO; MARTINEZ BISBAL, MARIA CARMEN)
Any: 2011 Autors: A R Croitor-Sava; M C Martínez-Bisbal; T Laudadio; J Piquer; B Celda; A Heerschap; D M Sima; S Van Huffel
Títol: Fusing in vivo and ex vivo NMR sources of information for brain tumor classification
Revista: 905922 - Measurement Science & Technology
Informació addicional: Volum: Número: Pàgina inicial: Pàgina final: Data de publicació: 01/01/2011
Classificació: Article ISI al 1er quartil



- 7- **Codi:** 074540 **Clau:** Article (CELDA MUÑOZ, BERNARDO; MARTINEZ BISBAL, MARIA CARMEN; MARTINEZ GRANADOS, M. BEATRIZ)
Any: 2011 **Autors:** M.C. Martínez-Bisbal; B. Martínez-Granados; A.I. Catalá-Gregori; J. Sánchez; B. Celda; L. Martí-Bonmatí
Títol: Complementariedad de la espectroscopía univóxel y la imagen de espectroscopía multivóxel obtenidas mediante bobina de cuadratura para la detección del carcinoma de prostata
Revista: 302244 - Radiología
Informació adicional: Volum: 53 Número: 1 Pàgina inicial: 47 Pàgina final: 55 Data de publicació: 01/01/2011
Classificació: Article Àmbit Internacional
-
- 8- **Codi:** 074541 **Clau:** Article (CELDA MUÑOZ, BERNARDO; MARTINEZ BISBAL, MARIA CARMEN; MARTINEZ GRANADOS, M. BEATRIZ)
Any: 2011 **Autors:** M.C. Martínez-Bisbal; V. Esteve; B. Martínez-Granados; B. Celda
Títol: Magnetic resonance microscopy contribution to interpret High-Resolution Magic Angle Spinning Metabolomic Data of Human Tumor Tissue
Revista: 913197 - Journal Of Biomedicine And Biotechnology
Informació adicional: Volum: Número: Pàgina inicial: Pàgina final: Data de publicació: 01/01/2011
Classificació: Article ISI al 3er quartil
-
- 9- **Codi:** 074543 **Clau:** Article (CELDA MUÑOZ, BERNARDO; MARTINEZ BISBAL, MARIA CARMEN; MARTINEZ GRANADOS, M. BEATRIZ)
Any: 2011 **Autors:** E. Fuster-García; C. Navarro; J.V. Salvador Tortajada; J.M. García-Gómez; C. Sáez; J. Calvar; J. Griffiths; M. Julià-Sapó; F.A. Howe; J. Pujol; A.C. Peet; A. Heerschap; A. Moreno-Torres; M.C. Martínez-Bisbal; B. Martínez-Granados; P. Wesseling; W. Semmler; J. Capellades; C. Majós; A. Alberich-Bayarri; A. Capdevila; D. Monleón; L. Martí-Bonmatí; C. Arús; B. Celda; M. Robles
Títol: Compatibility between 3T 1H SV-MRS data and automatic brain tumour diagnosis support systems based on databases of 1.5T 1H SV-MRS spectra
Revista: 910085 - Magnetic Resonance Materials in Physics Biology and Medicine
Informació adicional: Volum: 21 Número: 1 Pàgina inicial: 35 Pàgina final: 42 Data de publicació: 01/02/2011
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 10- **Codi:** 071017 **Clau:** Article (GALVEZ ALVAREZ, JORGE)
Any: 2011 **Autors:** Jorge Gálvez; Vicent M. Villar; María Gálvez-Llompарт; Jose María Amigó.
Títol: Chemistry explained by topology: an alternative approach.
Revista: 910326 - Combinatorial Chemistry & High Throughput Screening
Informació adicional: Volum: 14 Número: 4 Pàgina inicial: 279 Pàgina final: 283 Data de publicació: 05/2011
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 11- **Codi:** 061819 **Clau:** Article (GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON)
Any: 2011 **Autors:** Jorge Gálvez; Miriam Parreño; Jordi Pla; Jaime Sanchez; María Gálvez-Llompарт; Sergio Navarro; Ramón García-Domenech
Títol: Application of molecular topology to the prediction of water quality indices of alkylphenol pollutants
Revista: 310590 - International Journal of Chemoinformatics and Chemical Engineering
Informació adicional: Volum: 1 Número: 1 Pàgina inicial: 1 Pàgina final: 11 Data de publicació: 2011
Classificació: Article Àmbit Internacional
-
- 12- **Codi:** 070265 **Clau:** Article (GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON)
Any: 2011 **Autors:** Jordi Pla-Franco; María Gálvez-Llompарт; Jorge Gálvez; Ramón García-Domenech
Títol: Application of molecular topology for the prediction of reaction yields and anti-inflammatory activity of heterocyclic amidine derivatives
Revista: 913186 - International Journal Of Molecular Sciences
Informació adicional: Volum: 12 Número: Pàgina inicial: 1281 Pàgina final: 1292 Data de publicació: 2011
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-

-
- 13- **Codi:** 070266 **Clau:** Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2011 **Autors:** R. García-Domenech; Isabel Dense Manhenje; Yamileth Monje; Adassa López-Gonzalez; Rafael Marco; Catalina Tacho; Jorge Gálvez
Títol: Search of QSAR models for predicting the antiprotozoal activity and cytotoxicity in vitro of a group of pentamidine analogous compounds
Revista: 913841 - Letters In Drug Design & Discovery
Informació adicional: Volum: 8 Número: Pàgina inicial: 172 Pàgina final: 180 Data de publicació: 2011
Classificació: Article ISI al 4rt quartil
-
- 14- **Codi:** 061818 **Clau:** Article (*GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2011 **Autors:** Y. Marrero-Ponce; E. R. Martínez; G. M. Casañola-Martín; F. Pérez-Giménez; Y. Echeverría-Díaz; R. García-Domenech; J.E. Rodríguez Borges
Títol: Bond-Extended Stochastic and Nonstochastic Bilinear Indices. I. QSPR/QSAR Applications to the Description of Properties/Activities of Small-Medium Size Organic Compounds
Revista: 900829 - International Journal of Quantum Chemistry
Informació adicional: Volum: 111 Número: Pàgina inicial: 8 Pàgina final: 34 Data de publicació: 2011
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 15- **Codi:** 070267 **Clau:** Article (*GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2011 **Autors:** María Gálvez-Llompart; M.C. Recio; R. García-Domenech
Títol: Topological virtual screening: a way to find new compounds active in ulcerative colitis by inhibiting NF- κ B
Revista: 909338 - Molecular Diversity
Informació adicional: Volum: 15 Número: Pàgina inicial: 917 Pàgina final: 926 Data de publicació: 2011
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 16- **Codi:** 070268 **Clau:** Article (*GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2011 **Autors:** Yovani Marrero-Ponce; Dany Siverio-Mota; María Gálvez-Llompart; María C. Recio; Rosa M. Giner; Ramón García-Domenech; Francisco Torrens; Vicente J. Arán; María Lorena Cordero-Maldonado; Camila V. Esguera; Peter A.M. de Witte; Alexander D. Crawford
Títol: Discovery of novel anti-inflammatory drug-like compounds by aligning in silico and in vivo screening: The nitroindazolinone chemotype
Revista: 904356 - European Journal of Medicinal Chemistry
Informació adicional: Volum: 46 Número: Pàgina inicial: 5736 Pàgina final: 5753 Data de publicació: 2011
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 17- **Codi:** 070269 **Clau:** Article (*GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2011 **Autors:** María Gálvez-Llompart; Riccardo Zanni; Ramón García-Domenech
Títol: Modeling natural anti-inflammatory compounds by molecular topology
Revista: 913186 - International Journal Of Molecular Sciences
Informació adicional: Volum: 12 Número: Pàgina inicial: 9481 Pàgina final: 9503 Data de publicació: 2011
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 18- **Codi:** 078201 **Clau:** Article (*GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2011 **Autors:** Juan A. Castillo-Garit; Ramón García-Domenech; Yovany Marrero-Ponce; Francisco Torrens; Concepción Abad
Títol: Atom-based 3D-chiral quadratic indices. Part 3: prediction of the binding affinity of the stereoisomers of fenoterol to the β_2 adrenergic receptor
Revista: 904383 - Afinidad
Informació adicional: Volum: LXVIII Número: 555 Pàgina inicial: 334 Pàgina final: 340 Data de publicació: 2011
Classificació: Article ISI al 4rt quartil
-

- 19- **Codi:** 061549 **Clau:** Article (LOPEZ CANUT, VIOLETA)
Any: 2011 **Autors:** V. Lopez-Canut, M. Roca, J. Bertrán, V. Moliner, I. Tuñón
Títol: Promiscuity in Alkaline Phosphatase Superfamily. Unraveling Evolution through Molecular Simulations.
Revista: 900665 - Journal of the American Chemical Society
Informació addicional: Enviado **Volum:** Número: **Pàgina inicial:** **Pàgina final:** **Data de publicació:** 2011
Classificació: Article ISI al 1er quartil **VOL. 133 PÀG. 12090-12062**
-
- 20- **Codi:** 061550 **Clau:** Article (LOPEZ CANUT, VIOLETA)
Any: 2011 **Autors:** S.Martí, V. Moliner, J. Andrés, M. Roca, V. López-Canut, E. Silla, I. Tuñón, J. Bertrán
Títol: Diseño Computacional de Catalizadores Biológicos
Revista: 900623 - Anales de Química
Informació addicional: Aceptado y pendiente de publicación **Volum:** Número: **Pàgina inicial:** **Pàgina final:** **Data de publicació:** 2011
Classificació: Altres **VOL. 107 PÀG. 144-153**
-
- 21- **Codi:** 077054 **Clau:** Article (PEREZ GIMENEZ, FACUNDO)
Any: 2011 **Autors:** J. A. Castillo-Garit, M. C. Vega, M. Rolón, Y. Marrero-Ponce, A. Gómez-Barrio, J. A. Escario, A. Alvarez Bello, A. Montero, F. Torrens, F. Pérez-Giménez, V. J. Arán and C. Abad,
Títol: Ligand-based discovery of novel trypanosomicidal drug-like compounds: In silico identification and experimental support
Revista: 904356 - European Journal of Medicinal Chemistry
Informació addicional: Eur. J. Med. Chem. **Volum:** 46 **Número:** **Pàgina inicial:** 3324 **Pàgina final:** 3330 **Data de publicació:** 2011
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 22- **Codi:** 077522 **Clau:** Article (PEREZ GIMENEZ, FACUNDO)
Any: 2011 **Autors:** Y. Marrero-Ponce, E.R. Martínez, G.M. Casañola-Martin, F. Pérez-Giménez, Y.E. Díaz, R. Garcia-Domenech, J.E. Rodriguez Brogues
Títol: Bond-extended stochastic and nonstochastic bilinear indices. I. QSPR/QSAR applications to the description of properties/activities of small-medium size organic compounds.
Revista: 900829 - International Journal of Quantum Chemistry
Informació addicional: **Volum:** 111 **Número:** 1 **Pàgina inicial:** 8 **Pàgina final:** 34 **Data de publicació:** 2011
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 23- **Codi:** 067156 **Clau:** Article (TOMAS VERT, FRANCISCO)
Any: 2011 **Autors:** Vega-Hissi, E. G. ; Andrada, M. F. ; Zamarbide, G. ; Estrada, M. R. ; Tomás-Vert, F
Títol: Theoretical studies on sulfanilamide and derivatives with antibacterial activity: conformational and electronic analysis
Revista: 909303 - Journal of Molecular Modeling
Informació addicional: **Volum:** 17 **Número:** 6 **Pàgina inicial:** 1317 **Pàgina final:** 1323 **Data de publicació:** 2011
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 24- **Codi:** 067058 **Clau:** Article (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO)
Any: 2011 **Autors:** I. Tuñón, J. T. Hynes
Títol: A simple model for barrier frequencies for enzymatic reactions
Revista: 910825 - Chemphyschem
Informació addicional: **Volum:** 12 **Número:** **Pàgina inicial:** 184 **Pàgina final:** 190 **Data de publicació:** 2011
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 25- **Codi:** 067059 **Clau:** Article (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO)
Any: 2011 **Autors:** J. Lameira, C. N. Alves, I. Tuñón, S. Martí, V. Moliner
Títol: Enzyme molecular mechanism as a Starting Point to design new inhibitors: A theoretical study of O-GlcNAcase
Revista: 909613 - Journal of Physical Chemistry B
Informació addicional: **Volum:** 115 **Número:** **Pàgina inicial:** 6764 **Pàgina final:** 6775 **Data de publicació:** 2011
Classificació: Article ISI al 1er quartil



- 26- Codi: 067061 Clau: Article (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO)
 Any: 2011 Autors: S. Ferrer, S. Martí, J. Andrés, V. Moliner, I. Tuñón, J. Bertrán
 Títol: Molecular mechanism of chorismate mutase activity of promiscuous MbtI
 Revista: 909714 - Theoretical Chemistry Accounts
 Informació addicional: Volum: 128 Número: Pàgina inicial: 601 Pàgina final: 607 Data de publicació: 2011
 Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 27- Codi: 070245 Clau: Article (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO)
 Any: 2011 Autors: Ian H. Williams; J. Javier Ruiz Perñá; Iñaki Tuñón
 Títol: Does glycosyl transfer involve an oxacarbenium intermediate? Computational simulation of the lifetime of the methoxymethyl cation in water
 Revista: 900676 - Pure and Applied Chemistry
 Informació addicional: Volum: 83 Número: Pàgina inicial: 1507 Pàgina final: 1514 Data de publicació: 01/08/2011
 Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 28- Codi: 070246 Clau: Article (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO)
 Any: 2011 Autors: Jeronimo Lameira; Cláudio Nahum Alves; Iñaki Tuñón; Sergio Martí; and Vicent Moliner
 Títol: Enzyme Molecular Mechanism as a Starting Point to Design New Inhibitors: A Theoretical Study of O-GlcNAcase
 Revista: 909613 - Journal of Physical Chemistry B
 Informació addicional: Volum: 115 Número: Pàgina inicial: 6764 Pàgina final: 6775 Data de publicació: 04/05/2011
 Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 29- Codi: 062107 Clau: Article (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)
 Any: 2011 Autors: S. Martí; V. Moliner; J. Andrés; M. Roca; V. López-Canut; E. Silla; I. Tuñón; J. Bertrán
 Títol: Diseño Computacional de Catalizadores Biológicos
 Revista: 900623 - Anales de Química
 Informació addicional: Volum: 107 Número: Pàgina inicial: 144 Pàgina final: 153 Data de publicació: 2011
 Classificació: Altres
-
- 30- Codi: 069957 Clau: Article (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)
 Any: 2011 Autors: V. López-Canut; M. Roca; J. Bertrán; V. Moliner; I. Tuñón
 Títol: Promiscuity in Alkaline Phosphatase Superfamily. Unraveling Evolution through Molecular Simulations
 Revista: 900665 - Journal of the American Chemical Society
 Informació addicional: Volum: 133 Número: Pàgina inicial: 12050 Pàgina final: 12062 Data de publicació: 2011
 Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 31- Codi: 067237 Clau: Article (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
 Any: 2011 Autors: Agrisuelas, Jeronimo; Gabrielli, Claude; Garcia-Jareño, Jose Juan; Perrot, Hubert; Vicente, Francisco
 Títol: Ionic and Free Solvent Motion in Poly(azure A) Studied by ac-Electrogravimetry
 Revista: 914198 - Journal Of Physical Chemistry C
 Informació addicional: Volum: 115 Número: 22 Pàgina inicial: 11132 Pàgina final: 11139 Data de publicació: 2011
 Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 32- Codi: 073942 Clau: Article (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
 Any: 2011 Autors: J. Agrisuelas, C. Gabrielli, J. J. García-Jareño, H. Perrot, F. Vicente
 Títol: Ionic Exchanges Of Poly-(Azure A) Studied By Ac-Electrogravimetry
 Revista: 002506 - ECS Transactions
 Informació addicional: Volum: 35 Número: 10 Pàgina inicial: 43 Pàgina final: 51 Data de publicació: 2011
 Classificació: Article Àmbit Internacional

DUPLICADOS



- 33- Codi: 073943 Clau: Article (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2011 Autors: J. Agrisuelas, C. Delgado, C. Gabrielli, J. J. García-Jareño, H. Perrot, F. Vicente
Títol: Electrochemical stabilization of Prussian Blue films in NH₄Cl aqueous medium
Revista: 002506 - ECS Transactions
Informació addicional: Volum: 35 Número: 10 Pàgina inicial: 53 Pàgina final: 61 Data de publicació: 2011
Classificació: Article Àmbit Internacional
-
- 34- Codi: 074535 Clau: Article (*VILA BUSO, MARIA AMPARO OFEL*)
Any: 2011 Autors: M.Manconi, C.Sinicio, C.Caddeo, A.O.Vila, D.Valenti, A.M.Fadda
Títol: Penetration enhancer containing vesicles as carriers for dermal delivery of tretinoin
Revista: 903139 - International Journal of Pharmaceutics
Informació addicional: Volum: 412 Número: Pàgina inicial: 37 Pàgina final: 46 Data de publicació: 16/04/2011
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-



Capítols de Llibres i altres publicacions

FALTA
JUSTIFICANTS

- 1- Codi: 037723 Clau: Capítol de llibre (GARCIA DOMENECH, RAMON)
Any: 2011 Títol: Capítulos 8-13
Autors: José Luis Moreno Frigols; Ramón García Doménech; Gerardo M. Antón Fos
Llibre: Introducción a la Fisicoquímica
ISBN: 978-84-370-7966-0
Classificació: Capítol en llibre nacional

- 2- Codi: 043350 Clau: Capítol de llibre (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO)
Any: 2011 Títol: Hybrid Schemes Based on Quantum Mechanics/Molecular Mechanics Simulations: Goals to Success, Problems, and Perspectives
Autors: Silvia Ferrer, J. Javier Ruiz-Pernía, Sergio Martí, Vicent Moliner, Iñaki Tuñón, Juan Bertrán, Juan Andrés
Llibre: Advances in protein chemistry and structural biology. Volume 85
ISBN: 978-0-12-386485-7
Classificació: Capítol en llibre internacional



Llibres de CC i Publicacions Multimèdia

-
- 1- **Codi:** 043486 **Clau:** Llibre de contingut científic (*TOMAS VERT, FRANCISCO*)
Any: 2011 **Títol:** La Química en el segle XXI. Descubrir i conèixer
Autors: Francisco Tomás Vert
ISBN: 978-84-370-7896-0
Editorial: 000030 - Servei de Publicacions de la Universitat de València - S
Classificació: Llibre en Editorial de Prestigi
-
- 2- **Codi:** 043487 **Clau:** Llibre de contingut científic (*TOMAS VERT, FRANCISCO*)
Any: 2011 **Títol:** La Química en el siglo XXI. Descubrir i conocer
Autors: Francisco Tomás Vert
ISBN: 978-84-370-7897-7
Editorial: 000030 - Servei de Publicacions de la Universitat de València - S
Classificació: Llibre en Editorial de Prestigi
-



Participació en Congressos i Reunions Científiques

- 1- **Codi:** 089464 **Tipus de participació:** Ponència (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO*)
Any: 2011 **Títol:** Resonancia Magnetica Nuclear, una aproximación molecular (genómica y metabólica) al diagnóstico y pronóstico de tumores cerebrales
Autors: Bernardo Celda **Caràcter:** Nacional
Congrés: 1er ENCUENTRO MULTIDISCIPLINAR DE INVESTIGACIÓN EN CANCER DE LA COMUNIDAD VALENCIANA
Publicació:
Classificació: Ponència en Congrés Nacional sense Proceedings

- 2- **Codi:** 089465 **Tipus de participació:** Comunicació (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO*)
Any: 2011 **Títol:** Valor pronóstico de los subtipos moleculares del Glioblastoma Multiforme
Autors: Bernardo Celda, Rubén Ferrer-Luna, José Piquer, José Luis Llácer, Vicente Rovira, Pedro Riesgo. **Caràcter:** Nacional
Congrés: XVI Congreso de la Sociedad Española de Neurocirugía. SBNEC 2011
Publicació:
Classificació: Comunicació Nacional sense Proceedings

- 3- **Codi:** 089466 **Tipus de participació:** Poster (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO*)
Any: 2011 **Títol:** Correlation between clinical data and metabolic abnormalities in inferior colliculus for schizophrenic patients with auditory hallucinations
Autors: Bernardo Celda, Beatriz Martínez-Granados, M.Carmen Martínez-Bisbal, Vicente Belloch. **Caràcter:** Internacional
Congrés: 19th Annual Meeting of ISMRM (International Society for Magnetic Resonance in Medicine)
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings

- 4- **Codi:** 089467 **Tipus de participació:** Ponència (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO*)
Any: 2011 **Títol:** In vivo and ex vivo metabolic profiles as a clinical supporting molecular diagnosis tool
Autors: Bernardo Celda, MCarmen Martínez-Bisbal, Vicente Esteve, MBeatriz Martínez-Granados, Enrique Mollá and José Piquer **Caràcter:** Internacional
Congrés: Imagenano
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacionals sense Proceedings

- 5- **Codi:** 089468 **Tipus de participació:** Comunicació (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO*)
Any: 2011 **Títol:** Magnetic resonance microscopy on excised intact human tumour tissues
Autors: Bernardo Celda, MCarmen Martínez-Bisbal, Vicente Esteve **Caràcter:** Internacional
Congrés: ESMRMB
Publicació:
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional sense Proceedings

- 6- **Codi:** 089469 **Tipus de participació:** Poster (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO*)
Any: 2011 **Títol:** Morphological and molecular analysis of the interactions among bone, cartilage and biomaterials by microscopy NMR
Autors: Bernardo Celda, MCarmen Martínez-Bisbal, Vicente Esteve, MBeatriz Martínez-Granados, Enrique Mollá and José Piquer **Caràcter:** Internacional
Congrés: ESMRMB
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings



-
- 7- **Codi:** 089470 **Tipus de participació:** Poster (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO*)
Any: 2011 **Títol:** Molecular subtyping of GBM by combined use of high-throughput OMICS techniques, genomic, transcriptomic and metabolomic
Autors: Bernardo Celda, Ruben Ferrer-Luna **Caràcter:** Internacional
Congrés: ESMRMB
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 8- **Codi:** 089471 **Tipus de participació:** Ponència invitada (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO*)
Any: 2011 **Títol:** Metabolic profiles in biomedicine and clinical research
Autors: Bernardo Celda, MCarmen Martínez-Bisbal, MBeatriz Martínez-Granados, Vicent Esteve **Caràcter:** Internacional
Congrés: XXV MRS Workshop: from basic processing to advances in clinical applications.
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada
-
- 9- **Codi:** 091204 **Tipus de participació:** Comunicació (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE*)
Any: 2011 **Títol:** Molecular topology as a novel approach in Alzheimer's disease drug discovery
Autors: J. Wang, D. Land, J. Galvez, G. Pasinetti **Caràcter:** Internacional
Congrés: 63rd Annual Meeting of the American Academy of Neurology
Publicació:
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 10- **Codi:** 084858 **Tipus de participació:** Poster (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2011 **Títol:** Selection of new compounds active inflammatory bowel disease by application of molecular topology.
Autors: M. Galvez-Llompart, R. Garcia-Domenech, J. Gálvez **Caràcter:** Nacional
Congrés: I Congrés D Estudiants de Farmacia UV
Publicació:
Classificació: Pòster Nacional sense Proceedings
-
- 11- **Codi:** 084855 **Tipus de participació:** Poster (*GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2011 **Títol:** Aplicación de la topología molecular en predicción de la actividad leishmanicida y chalconas.
Autors: E. Madrid, C. Lenis, L. Magraner, E. González, R. Garcia-Domenech **Caràcter:** Nacional
Congrés: XII Congreso Ibérico Parasitología
Publicació:
Classificació: Pòster Nacional sense Proceedings
-
- 12- **Codi:** 084856 **Tipus de participació:** Poster (*GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2011 **Títol:** Discovering novel anti-inflammatory Drug-like compounds by aligning in silico and in vivo screening: the nitro-indazolinone chemotype.
Autors: R.M. Giner, Y. Marreo-Ponce, D. Siverio, M. Galvez-Llompart, M.C. REcio, R. Garcia-Domenech, F. Torrens, V.J. Arán, A.D. Crawford, P.A.M. de Witte **Caràcter:** Nacional
Congrés: Congreso Nacional de la Sociedad Española de Farmacología
Publicació:
Classificació: Pòster Nacional sense Proceedings
-
- 13- **Codi:** 084857 **Tipus de participació:** Poster (*GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2011 **Títol:** New inhibitors of IL-6 production in Caco-2 cells through molecular topology methodology.
Autors: Maria Galvez-Llompart, Riccardo Zanni and Ramon Garcia-Domenech **Caràcter:** Nacional
Congrés: XXXIII Congreso Nacional de la Sociedad Española de Farmacología
Publicació:
Classificació: Pòster Nacional sense Proceedings
-



- 14- **Codi:** 077460 **Tipus de participació:** Poster (*MONZO MANSANET, ISIDRO*)
Any: 2011 **Títol:** Estudio termodinámico de separación de fases de mezclas resina epoxi-termoplástico
Autors: Mario Culebras, Isidro Monzó, Clara M Gómez **Caràcter:** Nacional
Congrés: XXXIII Reunión bienal de la RSEQ
Publicació: PLE
Classificació: Pòster a Congrés Nacional amb Proceedings
-
- 15- **Codi:** 077461 **Tipus de participació:** Poster (*MONZO MANSANET, ISIDRO*)
Any: 2011 **Títol:** Influence of different nanofillers on the phase behaviour of epoxy/polystyrene blends
Autors: Mario Culebras, Isidro Monzó, Clara M Gómez **Caràcter:** Internacional
Congrés: European Polymer Congress 2011
Publicació: PLE
Classificació: Pòster a Congrés Internacional amb Proceedings
-
- 16- **Codi:** 080143 **Tipus de participació:** Poster (*TEJERO TOQUERO, ROBERTO*)
Any: 2011 **Títol:** Metal Interaction in Polytopic Receptors.
Autors: J. González, S. Blasco, M. Inclán, J. Pitarch, R. Belda, B. Verdejo, C. E. Castillo, M. A. Mañez, J.M. Llinares, H. R. Jiménez, R. Tejero, M.G. Basallote, C. Soriano, E. García-España. **Caràcter:** Internacional
Congrés: ISMEC 2011
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 17- **Codi:** 081301 **Tipus de participació:** Poster (*TEJERO TOQUERO, ROBERTO*)
Any: 2011 **Títol:** Metal interaction in polytopic receptors.
Autors: J. González, S. Blasco, M. Inclán, J. Pitarch, R. Belda, B. Verdejo, C.E. Castillo, M.A. Mañez, J.M. Llinares, H.R. Jimenez, R. Tejero, M.G. Basallote, C. Soriano, E. García-España. **Caràcter:** Internacional
Congrés: XXII International Symposium on Metal Complexes. ISMEC 2011.
Publicació: PLE
Classificació: Pòster a Congrés Internacional amb Proceedings
-
- 18- **Codi:** 080181 **Tipus de participació:** Ponència (*TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2011 **Títol:** Kinetic isotope effects on the highly promiscuous MbTI
Autors: Silvia Ferrer; Sergio Martí; Vicent Moliner; Iñaki Tuñón; Juan Bertrán **Caràcter:** Internacional
Congrés: Isotopes 2011
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacionals sense Proceedings
-
- 19- **Codi:** 080182 **Tipus de participació:** Ponència invitada (*TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2011 **Títol:** Ensemble-averaged QM/MM kinetic isotope effects for enzymatic reactions: The case of phosphotriesterase
Autors: J. Javier Ruiz-Pernía; Violeta López-Canut; Raquel Castillo; Vicent Moliner; Ian H. Williams; Iñaki Tuñón **Caràcter:** Internacional
Congrés: Isotopes 2011
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada
-
- 20- **Codi:** 080183 **Tipus de participació:** Ponència invitada (*TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2011 **Títol:** Unraveling evolution through molecular simulations. Catalysis in the Alkaline Phosphatase superfamily
Autors: Iñaki Tuñón **Caràcter:** Internacional
Congrés: Watoc 2011
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada

DUPLICADO



-
- 21- Codi: 080184 Tipus de participació: Ponència (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2011 Títol: ¿Qué puede decirnos la Química Computacional sobre la evolución?
Autors: Iñaki Tuñón Caràcter: Internacional
Congrés: XXIX Jornadas Chilenas de Química
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacionals sense Proceedings
-
- 22- Codi: 081528 Tipus de participació: Poster (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2011 Títol: QM/MM Study of the hydrogen bond and cation- π cooperativities in some protein(receptor)-ligand systems
Autors: L. Alzate-Morales; J. Caballero; I. Araya; F. Adasme; C. Muñoz; I. Tuñón Caràcter: Internacional
Congrés: XXIX Jornadas Chilenas de Química
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 23- Codi: 081529 Tipus de participació: Ponència (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2011 Títol: Molecular simulations of promiscuous activities: The MbtI case
Autors: S. Ferrer; S. Martí; V. Moliner; I. Tuñón; J. Bertrán Caràcter: Internacional
Congrés: World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2011)
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacionals sense Proceedings
-
- 24- Codi: 081530 Tipus de participació: Poster (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2011 Títol: Beyond the distinguished reaction coordinate. A new collective coordinate for the study of reactions in condensed phases.
Autors: J. J. Ruiz-Pernía; S. Martí; V. Moliner; I. Tuñón Caràcter: Internacional
Congrés: World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2011)
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 25- Codi: 081531 Tipus de participació: Poster (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2011 Títol: Application of collective coordinates for the study of the haloalkane dehalogenase reaction
Autors: R. García-Meseguer; I. Tuñón; J. J. Ruiz-Pernía Caràcter: Internacional
Congrés: World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2011)
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 26- Codi: 081532 Tipus de participació: Poster (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2011 Títol: Metallo beta-lactamases. A theoretical study of hydrolysis of beta-lactam antibiotics
Autors: C. Meliá; S. Ferrer; V. Moliner; I. Tuñón; J. Bertrán Caràcter: Internacional
Congrés: World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2011)
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 27- Codi: 081533 Tipus de participació: Poster (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2011 Títol: Exploring the use of QM/MM hybrid methods in the prediction of protein-ligand binding affinities
Autors: J. Alzate-Morales; I. Tuñón; J. Caballero; F. Adasme; C. Muñoz Caràcter: Internacional
Congrés: World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2011)
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings
-

- 28- **Codi:** 079828 **Tipus de participació:** Poster (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ARANDA MORATALLA, JUAN; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)
Any: 2011 **Títol:** Theoretical study of the reaction mechanism of Adenine N6-methyltransferase M. TaqI
Autors: J. Aranda; M. Sánchez-Tarín; M. Roca; I. Tuñón **Caràcter:** Internacional
Congrés: World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2011)
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 29- **Codi:** 079829 **Tipus de participació:** Poster (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ARANDA MORATALLA, JUAN; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)
Any: 2011 **Títol:** QM/MM study of Adenosine Deaminase reaction mechanism
Autors: K. Zinovjev, J. Aranda, M. Roca, I. Tuñón **Caràcter:** Internacional
Congrés: World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2011)
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 30- **Codi:** 079827 **Tipus de participació:** Poster (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)
Any: 2011 **Títol:** In search of dynamical recrossings to study the reversibility of a decarboxylation reaction
Autors: M. Roca; V. Moliner; I. Tuñón **Caràcter:** Internacional
Congrés: World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2011)
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 31- **Codi:** 080180 **Tipus de participació:** Ponència invitada (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)
Any: 2011 **Títol:** Transition structures and reaction mechanism of phosphodiester alkaline hydrolysis: Implications for the evolution of the AP superfamily
Autors: Violeta Lopez-Canut; Maite Roca; Iñaki Tuñón; Juan Bertran; Vicent Moliner **Caràcter:** Internacional
Congrés: Isotopes 2011
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada
-
- 32- **Codi:** 081264 **Tipus de participació:** Poster (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)
Any: 2011 **Títol:** Promiscuity in Alkaline Phosphatase superfamily. What can computational chemistry Tell us about evolution?
Autors: Violeta López-Canut, Maite Roca, Iñaki Tuñón, Juan Bertrán, Vicente Moliner **Caràcter:** Nacional
Congrés: XXXIII Reunión Bienal de la RSEQ
Publicació:
Classificació: Pòster Nacional sense Proceedings
-
- 33- **Codi:** 084688 **Tipus de participació:** Ponència (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2011 **Títol:** Ionic Exchanges of Poly-(Azure A) Studied by ac- Electrogravimetry.
Autors: J. Agrisuelas, C. Gabrielli, J. J. García-Jareño, H. Perrot, F. Vicente. **Caràcter:** Internacional
Congrés: 219th ECS Meeting
Publicació: PLE
Classificació: Ponència a Congrés Internacional amb Proceedings
-
- 34- **Codi:** 084689 **Tipus de participació:** Ponència (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2011 **Títol:** Simultaneous Viscoelastic and Colour Reflectance Changes During the Prussian Blue Electrochemical Reduction.
Autors: J. Agrisuelas, C. Gabrielli, J.J. García-Jareño, D. Giménez-Romero, H. Perrot, F. Vicente. **Caràcter:** Internacional
Congrés: 219th ECS Meeting
Publicació: PLE
Classificació: Ponència a Congrés Internacional amb Proceedings

- 35- **Codi:** 084690 **Tipus de participació:** Ponència (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2011 **Títol:** Algunas aplicaciones de la microbalanza electroquímica de cuarzo.
Autors: J. Agrisuelas, J.J. García-Jareño, F. Vicente. **Caràcter:** Nacional
Congrés: XXXII Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química, XIII Encontro Ibérico de Electroquímica
Publicació: PLE
Classificació: Ponència a Congrés Nacional amb Proceedings
-
- 36- **Codi:** 084691 **Tipus de participació:** Ponència (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2011 **Títol:** Caracterización de films electrodepositados de azul de Prusia mediante espectroscopias simultáneas de impedancia eléctrica, de masa y de color
Autors: J. Agrisuelas, J.J. García-Jareño, F. Vicente. **Caràcter:** Nacional
Congrés: XXXII Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química, XIII Encontro Ibérico de Electroquímica
Publicació: PLE
Classificació: Ponència a Congrés Nacional amb Proceedings
-
- 37- **Codi:** 084692 **Tipus de participació:** Ponència (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2011 **Títol:** Electrogravimetria de corriente alterna de poli-(Azure A)
Autors: J. Agrisuelas, C. Gabrielli, J.J. García-Jareño, H. Perrot, F. Vicente. **Caràcter:** Nacional
Congrés: XXXII Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química, XIII Encontro Ibérico de Electroquímica
Publicació: PLE
Classificació: Ponència a Congrés Nacional amb Proceedings
-
- 38- **Codi:** 084693 **Tipus de participació:** Ponència (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2011 **Títol:** Seguimiento espectroelectroquímico y mediante EOCM del efecto del NH₄Cl en la estabilización del azul de Prusia.
Autors: J. Agrisuelas, C. Delgado, J.J. García-Jareño, F. Vicente. **Caràcter:** Nacional
Congrés: XXXII Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química, XIII Encontro Ibérico de Electroquímica
Publicació: PLE
Classificació: Ponència a Congrés Nacional amb Proceedings
-
- 39- **Codi:** 084694 **Tipus de participació:** Ponència (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2011 **Títol:** Étude par ac-Electrogravimétrie du Transfert ionique et du solvant lors de l'oxydation des films de Poly-(o-toluidine) en milieu acide.
Autors: J. Agrisuelas, C. Gabrielli, J.J. García-Jareño, H. Perrot, F. Vicente. **Caràcter:** Internacional
Congrés: 23eme Forum sur les Impedances Electrochimiques.
Publicació: PLE
Classificació: Ponència a Congrés Internacional amb Proceedings
-
- 40- **Codi:** 084695 **Tipus de participació:** Ponència (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2011 **Títol:** Une Application du Module de l'Impédance du Circuit BVD.
Autors: C. Delgado, J. Agrisuelas, J.J. García-Jareño, F. Vicente. **Caràcter:** Internacional
Congrés: 23eme Forum sur les Impedances Electrochimiques.
Publicació: PLE
Classificació: Ponència a Congrés Internacional amb Proceedings

