

Tesis Dirigides

- 1_ **Codi:** 019099 **Clau:** Tesi Doctoral (*AGRISUELAS VALLES, JERONIMO*)
Any: 2013 **Títol:** (IN PROGRESS) Electrogravimetría y Espectroelectroquímica Simultáneas de Films de Azul de Prusia
Autor: Carla Delgado Sanchís **Director:** F. Vicente; J. J. García Jareño; J. Agrisuelas **Qualificació:**
Classificació: Tesis doctoral sense qualificació

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
1,00	0,00	0,00	0

-
- 2_ **Codi:** 019100 **Clau:** Tesi Doctoral (*AGRISUELAS VALLES, JERONIMO*)
Any: 2013 **Títol:** (IN PROGRESS) Amarillo de Prusia en Sistemas Multicapa
Autor: Carmen Moreno Guerrero **Director:** F. Vicente; J. J. García Jareño; J. Agrisuelas **Qualificació:**
Classificació: Tesis doctoral sense qualificació

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
1,00	0,00	0,00	0



Articles en Revistes

- 1_ **Codi:** 093369 **Clau:** Article (*AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2013 **Autors:** J. Agrisuelas; J.J. García-Jareño; C. Moreno-Guerrero; A. Roig; F. Vicente
Títol: Identification of electroactive sites in Prussian Yellow films
Revista: 901127 - Electrochimica Acta
Informació adicional: **Volum:** 113 **Número:** **Pàgina inicial:** 825 **Pàgina final:** 833 **Data de publicació:** 15/12/2013
Classificació: Article ISI al 1er quartil
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 2,00 | 0,00 | 12,00 | 12 |
-
- 2_ **Codi:** 093371 **Clau:** Article (*AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN; (096811) VICENTE PEDROS, FRANCISCO*)
Codi: 093371 **Clau:** Article (*AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2013 **Autors:** Jeronimo Agrisuelas, José García-Jareño, Manuel Piedras, Concha Sanz, Francisco Vicente
Títol: Characterization of a New Polypropylene+Graphite+Zinc Ternary Composite
Revista: 002506 - ECS Transactions
Informació adicional: **Volum:** 50 **Número:** 50 **Pàgina inicial:** 71 **Pàgina final:** 80 **Data de publicació:** 2013
Classificació: Article Àmbit Internacional
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 3,00 | 0,00 | 4,00 | 4 |
-
- 3_ **Codi:** 093370 **Clau:** Article (*AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN; (096812) VICENTE PEDROS, FRANCISCO*)
Codi: 093370 **Clau:** Article (*AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2013 **Autors:** Jeronimo Agrisuelas, Carla Delgado, José J. García-Jareño, Carmen Moreno-Guerrero, Antoni Francesc Roig, Francisco Vicente
Títol: Electrochromic behavior of Prussian Yellow
Revista: 002506 - ECS Transactions
Informació adicional: **Volum:** 50 **Número:** 31 **Pàgina inicial:** 435 **Pàgina final:** 447 **Data de publicació:** 2013
Classificació: Article Àmbit Internacional
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 3,00 | 0,00 | 4,00 | 4 |
-
- 4_ **Codi:** 096712 **Clau:** Article (*CRESPO CRESPO, RAUL; (096713) PIQUERAS GARCIA, CARMEN*)
Codi: 096712 **Clau:** Article (*CRESPO CRESPO, RAUL*)
Any: 2012 **Autors:** J. Kaleta, A. Akdag, R. Crespo, M.C. Piqueras, J. Michl
Títol: Evidence for an intermediate in the Methylation of CB11H12- with methyls triflate: Comparison of electrophilic substitution in cage boranes and in arenes
Revista: 917523 - Chempluschem
Informació adicional: **Volum:** 78 **Número:** 9 **Pàgina inicial:** 1174 **Pàgina final:** 1183 **Data de publicació:** 01/09/2012
Classificació: Article ISI al 4rt quartil / Article Àmbit Internacional
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC / Comissió</i> | <i>Pts FIU</i> | <i>Revisat</i> |
|------------------|-------------------|----------------------------|----------------|----------------|
| 0 | 0 | 6,00 / 4,00 | | 09/07/2014 |
- Observacions:**
Classificació Modificada a: Article Àmbit Internacional
-
- 5_ **Codi:** 084778 **Clau:** Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2013 **Autors:** S.J. Barigye; Y. Marrero-Ponce; Y. Martínez López; O. Martínez Santiago; F. Torrens; R. García-Domenech; J. Galvez
Títol: Event-based criteria in GT-STAF information indices: theory, exploratory diversity analysis and QSPR applications
Revista: 910759 - Sar and Qsar in Environmental Research
Informació adicional: **Volum:** 24 **Número:** 1 **Pàgina inicial:** 3 **Pàgina final:** 34 **Data de publicació:** 2013
Classificació: Article ISI al 2on quartil
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> | <i>Revisat</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|----------------|
| 2,00/1,00 | 0,00 / 1,00 | 10,00 | 5 | 09/07/2014 |
- Observacions:**
Nombre de PDI del Departament rectificat: 1,00
Nombre de PDI de fora del Departament rectificat: 1,00

- 6_ **Codi:** 090310 **Clau:** Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2013 **Autors:** Teresa Delgado-Pérez; Melireth Holmquist; Laura Francés; Jorge Gálvez; Ramón García-Domenech
Títol: Aplicación de la topología molecular para la predicción de biodegradación anaerobia de clorofenoles.
Revista: 904383 - Afinidad
Informació adicional: **Volum:** LXX **Número:** 562 **Pàgina inicial:** 107 **Pàgina final:** 111 **Data de publicació:** 2013
Classificació: Article ISI al 4rt quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
2,00	0,00	6,00	6

- 7_ **Codi:** 090312 **Clau:** Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2013 **Autors:** Ángela Debenedetti López; Irene Iglesias Gómez; Lissette Retana Moreira; Jorge Gálvez Alvarez; Ramón García-Domenech
Títol: Aplicación de la topología molecular en la predicción de la actividad antiprotozoaria de derivados del benzimidazol
Revista: 309784 - Nereis
Informació adicional: **Volum:** 5 **Número:** **Pàgina inicial:** 9 **Pàgina final:** 17 **Data de publicació:** 2013
Classificació: Article Àmbit Nacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
2,00	0,00	3,00	3

- 8_ **Codi:** 090313 **Clau:** Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2013 **Autors:** Miguel Espinosa López; Vincenzo La Franca Pitarresi; Salvador Sayas Valero; Jorge Gálvez ; Ramón García-Domenech
Títol: Application of Molecular Topology to the Prediction of the Reaction Yield and Anticancer Activity of Imidazole and Guanidine Derivatives
Revista: 310590 - International Journal of Chemoinformatics and Chemical Engineering
Informació adicional: **Volum:** 3 **Número:** 2 **Pàgina inicial:** 64 **Pàgina final:** 74 **Data de publicació:** 2013
Classificació: Article Àmbit Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>	<i>Revisat</i>
2,00/2,00	0,00 / 1,00	4,00	2.67	08/07/2014

Observacions:

Nombre de PDI del Departament rectificat: 2,00
 Nombre de PDI de fora del Departament rectificat: 1,00

- 9_ **Codi:** 081806 **Clau:** Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA*)
Any: 2013 **Autors:** Maria Galvez-Llompарт; Jorge Galvez; Ramon Garcia-Domenech; Lemont B. Kier.
Títol: Predicting Dyspnea Inducers by Molecular Topology.
Revista: 312414 - Journal of chemistry
Informació adicional: **Volum:** **Número:** **Pàgina inicial:** **Pàgina final:** **Data de publicació:** 2013
Classificació: Article Àmbit Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
3,00	0,00	4,00	4

- 10_ **Codi:** 090314 **Clau:** Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA*)
Any: 2013 **Autors:** María Galvez-Llompарт; María del Carmen Recio Iglesias; Jorge Gálvez ; Ramón García-Domenech
Títol: Novel potential agents for ulcerative colitis by molecular topology: suppression of IL-6 production in Caco-2 and RAW264.7 cell lines
Revista: 909338 - Molecular Diversity
Informació adicional: **Volum:** 17 **Número:** **Pàgina inicial:** 573 **Pàgina final:** 593 **Data de publicació:** 2013
Classificació: Article ISI al 1er quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
3,00	0,00	12,00	12



- 11_ **Codi:** 084779 **Clau:** Article (GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA; ZANNI, RICCARDO)
Any: 2013 **Autors:** Jorge Galvez; María Galvez-Llompарт; Riccardo Zanni; Ramón García-Domenech
Títol: Advances in the molecular modeling and quantitative structure-activity relationship based design for antihistamines
Revista: 915352 - Expert Opinion On Drug Discovery
Informació adicional: **Volum:** 8 **Número:** 3 **Pàgina inicial:** 305 **Pàgina final:** 317 **Data de publicació:** 2013
Classificació: Article ISI al 2on quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
3,00	0,00	10,00	10

- 12_ **Codi:** 090309 **Clau:** Article (GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA; ZANNI, RICCARDO)
Any: 2013 **Autors:** Ramón García-Domenech; María Gálvez-Llompарт; Riccardo Zanni; María C Recio ; Jorge Gálvez
Títol: QSAR methods for the discovery of new inflammatory bowel disease drugs
Revista: 915352 - Expert Opinion On Drug Discovery
Informació adicional: **Volum:** 8 **Número:** 8 **Pàgina inicial:** 933 **Pàgina final:** 949 **Data de publicació:** 2013
Classificació: Article ISI al 2on quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
3,00	0,00	10,00	10

- 13_ **Codi:** 091613 **Clau:** Article (GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA; ZANNI, RICCARDO)
Any: 2013 **Autors:** Jorge Galvez; Maria Galvez-Llompарт; Riccardo Zanni; Ramon Garcia-Domenech
Títol: Molecular topology : Dissimilar similarities
Revista: 311797 - Drug Discovery Today: Technologies
Informació adicional: **Volum:** 10 **Número:** 4 **Pàgina inicial:** e475 **Pàgina final:** e481 **Data de publicació:** 12/2013
Classificació: Article Àmbit Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
3,00	0,00	4,00	4

- 14_ **Codi:** 090548 **Clau:** Article (GALVEZ LLOMPART, MARIA)
Any: 2013 **Autors:** Mérida S; Fustero S; Villar VM; Gálvez M; Román R; Amigó JM.
Títol: Efficacy and activity prediction by molecular topology of new drugs against the Tetranychus urticae plague.
Revista: 910326 - Combinatorial Chemistry & High Throughput Screening
Informació adicional: **Volum:** 16 **Número:** 6 **Pàgina inicial:** 473 **Pàgina final:** 483 **Data de publicació:** 07/2013
Classificació: Article ISI al 2on quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>	<i>Revisat</i>
1,00/1,00	0,00 / 2,00	10,00	3,33	08/07/2014

Observacions:

Nombre de PDI del Departament rectificat: 1,00
 Nombre de PDI de fora del Departament rectificat: 2,00

- 15_ **Codi:** 081807 **Clau:** Article (GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA; ZANNI, RICCARDO)
Any: 2013 **Autors:** María Gálvez-Llompарт, Riccardo Zanni, Patrizia Romualdi, Ramón García-Domenech
Títol: Selection of nutraceutical compounds as COX inhibitors by molecular topology
Revista: 909333 - Medicinal Chemistry Research
Informació adicional: **Volum:** 22 **Número:** 7 **Pàgina inicial:** 3466 **Pàgina final:** 3477 **Data de publicació:** 2013
Classificació: Article ISI al 3er quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
2,00	0,00	8,00	8



- 16_ **Codi:** 090311 **Clau:** Article (*GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA; ZANNI, RICCARDO*)
Any: 2013 **Autors:** Ramón García-Domenech; Riccardo Zanni; María Galvez-Llompert; J. Vicente de Julián-Ortiz
Títol: Modeling anti-allergic natural compounds by Molecular Topology
Revista: 910326 - Combinatorial Chemistry & High Throughput Screening
Informació adicional: **Volum:** 16 **Número:** 8 **Pàgina inicial:** 628 **Pàgina final:** 635 **Data de publicació:** 2013
Classificació: Article ISI al 2on quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
2,00	0,00	10,00	10

- 17_ **Codi:** 094530 **Clau:** Article (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2013 **Autors:** Miquel Avella-Oliver, David Gimenez-Romero, Sergi Morais, Miguel Angel Gonzalez-Martinez, Paulo Roberto Bueno, Rosa Puchades and Angel Maquieira
Títol: INSEL: an in silico method for optimizing and exploring biorecognition assays
Revista: 909184 - Chemical Communications
Informació adicional: **Volum:** 49 **Número:** **Pàgina inicial:** 10868 **Pàgina final:** 10870 **Data de publicació:** 24/09/2013
Classificació: Article ISI al 1er quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC / Comissió</i>	<i>Pts FIU</i>	<i>Revisat</i>
1,00	0,00	12,00 / 0,00	0	09/07/2014

Observacions:Puntuació Modificada per: *No UVEG*

- 18_ **Codi:** 071157 **Clau:** Article (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)
Any: 2012 **Autors:** Begoña Milián-Medina; Johannes Gierschner
Títol: #-960;-Conjugation
Revista: 916969 - Wiley Interdisciplinary Reviews-Computational Molecular Science
Informació adicional: **Volum:** 02 **Número:** **Pàgina inicial:** 513 **Pàgina final:** 524 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>	<i>Revisat</i>
0	0	12,00	Sense valor	10/09/2014

- 19_ **Codi:** 071158 **Clau:** Article (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)
Any: 2012 **Autors:** Begoña Milián-Medina; Johannes Gierschner
Títol: Computational Design of Low Singlet-Triplet Gap All-Organic Molecules for OLED application
Revista: 913012 - Organic Electronics
Informació adicional: **Volum:** 13 **Número:** **Pàgina inicial:** 985 **Pàgina final:** 991 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>	<i>Revisat</i>
0	0	12,00	Sense valor	23/07/2014

- 20_ **Codi:** 090465 **Clau:** Article (*MONZO MANSANET, ISIDRO; GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2013 **Autors:** David Giménez-Romero, Paulo R. Bueno, Naira C. Pesquero, Isidro S. Monzó, Rosa Puchades, and Ángel Maquieira
Títol: Elucidation of Carbohydrate Molecular Interaction Mechanism of Recombinant and Native ArtinM
Revista: 909613 - Journal of Physical Chemistry B
Informació adicional: **Volum:** 117 **Número:** 28 **Pàgina inicial:** 8360 **Pàgina final:** 8369 **Data de publicació:** 25/06/2013
Classificació: Article ISI al 2on quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
2,00	0,00	10,00	10



- 21_ **Codi:** 096232 **Clau:** Article (*PEREZ GIMENEZ, FACUNDO*)
Any: 2013 **Autors:** Stephen J. Bargye, Yovani Marrero-Ponce, Vitalio Alfonso-Reguera, Facundo Pérez-Giménez
Títol: Extended GT-STAF information indices based on Markov approximation models
Revista: 903311 - Chemical Physics Letters
Informació adicional: **Volum:** 570 **Número:** **Pàgina inicial:** 147 **Pàgina final:** 152 **Data de publicació:** 29/03/2013
Classificació: Article ISI al 2on quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
1,00	0,00	10,00	10

- 22_ **Codi:** 096233 **Clau:** Article (*PEREZ GIMENEZ, FACUNDO*)
Any: 2013 **Autors:** Stephen J. Barigye, Yovani Marrero-Ponce, Oscar Martinez Santiago, Yoan Martínez López, Facundo Pérez-Giménez and Francisco Torrens
Títol: Shannon's Mutual, Conditional and Joint Entropy Information Indices: Generalization of Global Indices Defined from Local Vertex Invariants
Revista: 914583 - Current Computer-Aided Drug Design
Informació adicional: **Volum:** 9 **Número:** **Pàgina inicial:** 164 **Pàgina final:** 183 **Data de publicació:** 27/04/2013
Classificació: Article ISI al 2on quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>	<i>Revisat</i>
1,00/1,00	0,00 / 1,00	10,00	5	09/07/2014

Observacions:

Nombre de PDI del Departament rectificat: 1,00
 Nombre de PDI de fora del Departament rectificat: 1,00

- 23_ **Codi:** 096234 **Clau:** Article (*PEREZ GIMENEZ, FACUNDO*)
Any: 2013 **Autors:** Martínez Albelo, E.R., Marrero Ponce, Y., Barigye, S.J., Echeverría-Díaz, Y., Pérez-Giménez, f.
Títol: QSPR/QSAR studies of 2-furylethylenes using bond-level quadratic indices and comparison with other computational approaches
Revista: 914926 - Journal Of The Mexican Chemical Society
Informació adicional: **Volum:** 57 **Número:** 1 **Pàgina inicial:** 61 **Pàgina final:** 68 **Data de publicació:** 31/01/2013
Classificació: Article ISI al 4rt quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
1,00	0,00	6,00	6

- 24_ **Codi:** 096713 **Clau:** Article (*PIQUERAS GARCIA, CARMEN*)
Any: 2012 **Autors:** J. Kaleta, A. Akdag, R. Crespo, M.C. Piqueras, J. Michl
Títol: Evidence for an intermediate in the methylation of C_B11H₁₂- with methyl triflate: Comparison of electrophilic substitution in cages boranes and in arenes
Revista: 917523 - Chempluschem
Informació adicional: **Volum:** 78 **Número:** 9 **Pàgina inicial:** 1174 **Pàgina final:** 1183 **Data de publicació:** 18/04/2012
Classificació: Article ISI al 4rt quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC / Comissió</i>	<i>Pts FIU</i>	<i>Revisat</i>
0	0	6,00 / 0,00		09/07/2014

Observacions:

Puntuació Modificada per: *Duplicat (096712)*

- 25_ **Codi:** 091580 **Clau:** Article (*TEJERO TOQUERO, ROBERTO*)
Any: 2013 **Autors:** Roberto Tejero, David Snyder, Binchen Mao, James M. Aramini, Gaetano T. Montelone
Títol: PDBStat: a universal restraint converter and restraint analysis software package for protein NMR
Revista: 908599 - Journal of Biomolecular NMR
Informació adicional: **Volum:** 56 **Número:** 4 **Pàgina inicial:** 337 **Pàgina final:** 351 **Data de publicació:** 30/07/2013
Classificació: Article ISI al 1er quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
1,00	0,00	12,00	12



- 26_ **Codi:** 091581 **Clau:** Article (*TEJERO TOQUERO, ROBERTO*)
Any: 2013 **Autors:** Antonio Rosato, Roberto Tejero, Gaetano T. Montelione
Títol: Quality assessment of protein NMR structures
Revista: 908890 - Current Opinion in Structural Biology
Informació adicional: **Volum:** 23 **Número:** 5 **Pàgina inicial:** 715 **Pàgina final:** 724 **Data de publicació:** 21/09/2013
Classificació: Article ISI al 1er quartil
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 1,00 | 0,00 | 12,00 | 12 |
-
- 27_ **Codi:** 094889 **Clau:** Article (*TEJERO TOQUERO, ROBERTO*)
Any: 2013 **Autors:** David A. Snyder; Jennifer Grullon; Yuanpeng J. Huang; Roberto Tejero; Gaetano T. Montelione2*
Títol: The expanded FindCore method for identification of a core atom set for assessment of protein structure prediction
Revista: 900355 - Proteins-Structure Function And Bioinformatics
Informació adicional: **Volum:** **Número:** **Pàgina inicial:** **Pàgina final:** **Data de publicació:** 10/12/2013
Classificació: Article ISI al 2on quartil
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 1,00 | 0,00 | 10,00 | 10 |
-
- 28_ **Codi:** 090810 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2013 **Autors:** K. Swiderek, I. Tuñón, S. Martí, V. Moliber, J. Bertrán
Títol: Role of Solvent on Nonenzymatic Peptide Bond Formation Mechanisms and Kinetic Isotope Effects
Revista: 900665 - Journal of the American Chemical Society
Informació adicional: **Volum:** 135 **Número:** **Pàgina inicial:** 8708 **Pàgina final:** 8719 **Data de publicació:** 26/05/2013
Classificació: Article ISI al 1er quartil
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 1,00 | 0,00 | 12,00 | 12 |
-
- 29_ **Codi:** 092611 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2013 **Autors:** K. Swiderek, I. Tuñón, V. Moliner
Títol: Predicting enzymatic reactivity: from theory to design
Revista: 916969 - Wiley Interdisciplinary Reviews-Computational Molecular Science
Informació adicional: **Volum:** **Número:** **Pàgina inicial:** **Pàgina final:** **Data de publicació:** 08/10/2013
Classificació: Article ISI al 1er quartil
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 1,00 | 0,00 | 12,00 | 12 |
-
- 30_ **Codi:** 092622 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2013 **Autors:** Reis, M.; Alves, C.N.; Lameira, J.; Tuñón García de Vicuña, Ignacio; Martí, S.; Moliner, V.
Títol: The catalytic mechanism of glyceraldehyde 3-phosphate dehydrogenase from Trypanosoma cruzi elucidated via the QM/MM approach
Revista: 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics
Informació adicional: **Volum:** 15 **Número:** **Pàgina inicial:** 3772 **Pàgina final:** 3785 **Data de publicació:** 14/01/2013
Classificació: Article ISI al 1er quartil
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 1,00 | 0,00 | 12,00 | 12 |
-
- 31_ **Codi:** 089911 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; GARCIA MESEGUER, RAFAEL*)
Any: 2013 **Autors:** García Meseguer, Rafael; Martí, Sergio; Ruiz-Pernía, J. Javier; Moliner, Vicent; Tuñón, Iñaki
Títol: Studying the role of protein dynamics in an SN2 enzyme reaction using free-energy surfaces and solvent coordinates
Revista: 915060 - Nature Chemistry
Informació adicional: **Volum:** 5 **Número:** 7 **Pàgina inicial:** 566 **Pàgina final:** 571 **Data de publicació:** 07/2013
Classificació: Article ISI al 1er quartil
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 2,00 | 0,00 | 12,00 | 12 |

- 32_ **Codi:** 092672 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; GARCIA MESEGUER, RAFAEL*)
Any: 2013 **Autors:** J. Javier Ruiz-Pernia; Louis Y. P. Luk; Rafael García-Meseguer; Sergio Martí; E. Joel Loveridge; Iñaki Tuñón; Vicent Moliner; and Rudolf K. Allemann
Títol: Increased dynamic effects in a catalytically compromised variant of Escherichia coli Dihydrofolate Reductase
Revista: 900665 - Journal of the American Chemical Society
Informació adicional: **Volum:** 135 **Número:** **Pàgina inicial:** 18689 **Pàgina final:** 18696 **Data de publicació:** 19/11/2013
Classificació: Article ISI al 1er quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
2,00	0,00	12,00	12

- 33_ **Codi:** 092549 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ROCA MOLINER, MARIA TERESA*)
Any: 2013 **Autors:** L. Y. P. Luk, J. J. Ruiz-Pernia, W. M. Dawson, M. Roca, E. J. Loveridge, D. R. Glowacki, J. N. Harvey, A. J. Mulholland, I. Tuñón, V. Moliner, R. K. Allemann
Títol: Unraveling the role of protein dynamics in dihydrofolate reductase catalysis
Revista: 902528 - Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America
Informació adicional: **Volum:** 110 **Número:** **Pàgina inicial:** 16344 **Pàgina final:** 16349 **Data de publicació:** 08/10/2013
Classificació: Article ISI al 1er quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
2,00	0,00	12,00	12

- 34_ **Codi:** 094568 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ZINOVJEVS, KIRILS*)
Any: 2013 **Autors:** Kirill Zinovjev; Jose Javier Ruiz-Pernia; Iñaki Tuñón
Títol: Toward an automatic determination of enzymatic reaction mechanisms and their activation free energies
Revista: 913200 - Journal Of Chemical Theory And Computation
Informació adicional: **Volum:** 9 **Número:** 8 **Pàgina inicial:** 3740 **Pàgina final:** 3749 **Data de publicació:** 17/06/2013
Classificació: Article ISI al 1er quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
2,00	0,00	12,00	12

- 35_ **Codi:** 096811 **Clau:** Article (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO*)
Any: 2013 **Autors:** J. Agrisuelas, J.J. García-Jareño, M. Piedras, C. Sanz, F. Vicente
Títol: Characterization of a new polypropylene +graphite+zinc ternary composite
Revista: 002506 - ECS Transactions
Informació adicional: **Volum:** 50 **Número:** 50 **Pàgina inicial:** 71 **Pàgina final:** 80 **Data de publicació:** 2013
Classificació: Article Àmbit Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC / Comissió</i>	<i>Pts FIU</i>	<i>Revisat</i>
1,00	0,00	4,00 / 0,00	0	09/07/2014

Observacions:

Puntuació Modificada per: *Duplicat (093371)*

- 36_ **Codi:** 096812 **Clau:** Article (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO*)
Any: 2013 **Autors:** J. Agrisuelas; C. Delgado; J.J. García-Jareño; C. Moreno; A. Roig; F. Vicente
Títol: Electrochromic behavior of Prussian Yellow
Revista: 002506 - ECS Transactions
Informació adicional: **Volum:** 50 **Número:** 31 **Pàgina inicial:** 435 **Pàgina final:** 447 **Data de publicació:** 2013
Classificació: Article Àmbit Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC / Comissió</i>	<i>Pts FIU</i>	<i>Revisat</i>
1,00	0,00	4,00 / 0,00	0	09/07/2014

Observacions:

Puntuació Modificada per: *Duplicat (093370)*



- 37_ **Codi:** 094566 **Clau:** Article (*ZINOVJEVS, KIRILS*)
Any: 2012 **Autors:** Kirill Zinovjev; Sergio Martí; Iñaki Tuñón
Títol: A collective coordinate to obtain free energy profiles for complex reactions in condensed phases
Revista: 913200 - Journal Of Chemical Theory And Computation
Informació adicional: **Volum:** 8 **Número:** 5 **Pàgina inicial:** 1795 **Pàgina final:** 1801 **Data de publicació:** 29/03/2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>	<i>Revisat</i>
0	0	12,00	Sense valor	10/09/2014

- 38_ **Codi:** 094567 **Clau:** Article (*ZINOVJEVS, KIRILS*)
Any: 2013 **Autors:** Kirill Zinovjev; Edvards Liepinsh
Títol: Validation of the CHARMM27 force field for nucleic acids using 2D nuclear overhauser effect spectroscopy
Revista: 313421 - Journal of Biophysical Chemistry
Informació adicional: **Volum:** 4 **Número:** 2 **Pàgina inicial:** 58 **Pàgina final:** 65 **Data de publicació:** 10/05/2013
Classificació: Article Àmbit Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC / Comissió</i>	<i>Pts FIU</i>	<i>Revisat</i>
1,00	0,00	4,00 / 0,00	0	09/07/2014

Observacions:

Puntuació Modificada per: *No Documentat*



Capítols de Llibres i altres publicacions

1_ **Codi:** 057979 **Clau:** Document científic-tècnic (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)

Any: 2012 **Títol:** Próximos progresos en la investigación del LES en Valencia.

Autors: José Ramón Ivorra; Elena Grau Garcia; David Giménez Romero

Llibre: AVALUS

ISBN:

Classificació: Document científic-tècnic nacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC / Comissió</i>	<i>Pts FIU</i>	<i>Revisat</i>
0	0	3,00 / 0,00		09/07/2014

Observacions:

Puntuació Modificada per: *No Documentat*



Participació en Congressos i Reunions Científiques

- 1_ **Codi:** 111098 **Tipus de participació:** Comunicació (*AGRISUELAS VALLES, JERONIMO*)
Any: 2013 **Títol:** ETUDE PAR ac-ELECTROGRAVIMETRIE DES PHENOMENES D'INSERTION D'IONS AU SEIN DE FILM COMPOSITES DE PPY-SDS/CE02
Autors: C. BENMOUHOUB, A. KADRI, J. AGRISUELAS, C. GABRIELLI, A. PAILLERET, H. PERROT, O. SEL
Caràcter: Internacional
Congrés: 24ème Forum sur les Impédances Electrochimiques
Publicació: Libro de Resúmenes del congreso
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
1,00	0,00	0,60	0.6

- 2_ **Codi:** 106986 **Tipus de participació:** Poster (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA; ZANNI, RICCARDO*)
Any: 2013 **Títol:** Modelling susceptibility to multi-target anaerobic bacteria by Molecular Topology
Autors: Ramón García-Domenech, María Gálvez-Llompert, Riccardo Zanni, Jorge Gálvez
Caràcter: Internacional
Congrés: 8th International Symposium on Anaerobic Microbiology (ISAM8)
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
3,00	0,00	0,60	0.6

- 3_ **Codi:** 106987 **Tipus de participació:** Comunicació (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA; ZANNI, RICCARDO*)
Any: 2013 **Títol:** Selection of novel agents against Clostridium difficile by Molecular Topology
Autors: Jorge Gálvez, María Gálvez-Llompert, Riccardo Zanni and Ramón García-Domenech
Caràcter: Internacional
Congrés: 8th International Symposium on Anaerobic Microbiology (ISAM8)
Publicació:
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
3,00	0,00	0,60	0.6

- 4_ **Codi:** 112576 **Tipus de participació:** Comunicació (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2013 **Títol:** DESARROLLO DE UNA METODOLOGÍA IN SILICO PARA LA OPTIMIZACIÓN DE INMUNOENSAYOS
Autors: M. Avella‐Oliver, D. Gimenez‐Romero, S. Morais, P.R. Bueno, R. Puchades y A. Maquieira
Caràcter: Nacional
Congrés: XXXIV REUNIÓN BIENAL DE LA REAL SOCIEDAD ESPAÑOLA DE QUÍMICA (RSEQ)
Publicació: LIBRO DE RESÚMENES DE SIMPOSIOS (ISBN: 978-84-695-8511-5)
Classificació: Comunicació a Congrés Nacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
1,00	0,00	0,30	0.3

- 5_ **Codi:** 112577 **Tipus de participació:** Poster (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2013 **Títol:** ESTUDIO DE LAS INTERACCIONES MOLECULARES DE LA RED IDIOTIPOANTIIDIOTIPO DEL LUPUS ERITEMATOSO SISTÉMICO MEDIANTE INTERFEROMETRÍA DE POLARIZACIÓN DUAL (DPI)
Autors: N.M. do Nascimento, D. Giménez-Romero, S. Morais, A. Maquieira y R. Puchades
Caràcter: Nacional
Congrés: XXXIV REUNIÓN BIENAL DE LA REAL SOCIEDAD ESPAÑOLA DE QUÍMICA (RSEQ)
Publicació: LIBRO DE RESÚMENES DE SIMPOSIOS (ISBN: 978-84-695-8511-5)
Classificació: Pòster a Congrés Nacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
1,00	0,00	0,30	0.3

- 6_ **Codi:** 112578 **Tipus de participació:** Poster (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2013 **Títol:** DUAL POLARIZATION INTERFEROMETRY FOR SENSING THE IDIOTYPE-ANTIIDIOTYPE NETWORK
Autors: Noelle Mariane do Nascimento, David Gimenez-Romero, Sergi Morais, Miguel Angel Gonzalez-Martinez, Jose Luis Lopez-Paz, Rosa Puchades, Angel Maquieira
Caràcter: Internacional
Congrés: EUROANALYSIS XVII Conference is supported by the Ministry of Science and Higher Education in the framework of subsidies for R&D support activities
Publicació: Book of Abstracts (ISBN: 978-83-7798-089-7)
Classificació: Pòster a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
1,00	0,00	0,60	0.6

- 7_ **Codi:** 112579 **Tipus de participació:** Poster (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2013 **Títol:** ESTUDIO DE REGENERACIÓN DE BIOSENSORES MEDIANTE INTERFEROMETRÍA DE POLARIZACIÓN DUAL
Autors: J.L. López-Paz, M.A. González-Martínez, D. Giménez-Romero, A. Maquieira, R. Puchades
Caràcter: Internacional
Congrés: VII International Workshop on Sensors and Molecular Recognition
Publicació: LIBRO DE ARTICULOS (ISBN: 978-84-695-8811-6)
Classificació: Pòster a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
1,00	0,00	0,60	0.6

- 8_ **Codi:** 112581 **Tipus de participació:** Poster (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2013 **Títol:** UN MÉTODO COMPUTACIONAL PARA LA EXPLORACIÓN VIRTUAL DE IMMUNOENSAYOS.
Autors: M. Avella-Oliver, D. Gimenez-Romero, S. Morais, R. Puchades, A. Maquieira
Caràcter: Internacional
Congrés: VII International Workshop on Sensors and Molecular Recognition
Publicació: LIBRO DE ARTICULOS (ISBN: 978-84-695-8811-6)
Classificació: Pòster a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
1,00	0,00	0,60	0.6

- 9_ **Codi:** 112583 **Tipus de participació:** Poster (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2013 **Títol:** ESTUDIO DE LA RED IDIOTIPO-ANTIIDIOTIPO EN PACIENTES CON LUPUS ERITEMATOSO SISTÉMICO
Autors: N. Nascimento, D. Gimenez Romero, A. Maquieira Catala, R. Puchades.
Caràcter: Internacional
Congrés: VII International Workshop on Sensors and Molecular Recognition
Publicació: LIBRO DE ARTICULOS (ISBN: 978-84-695-8811-6)
Classificació: Pòster a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
1,00	0,00	0,60	0.6

- 10_ **Codi:** 081282 **Tipus de participació:** Ponència (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)
Any: 2012 **Títol:** Computational Design of low singlet-triplet gap all-organic molecules for OLED application
Autors: B. Milián Medina; J. Gierschner
Caràcter: Internacional
Congrés: 3rd European Symposium on Computing pi-Conjugated Compounds (CpiC3)
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
0	0	0,60	Sense valor

- 11_ **Codi:** 081283 **Tipus de participació:** Ponència (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)
Any: 2012 **Títol:** Multiresponsive Organic Crystals
Autors: J. Gierschner; S. Varghese; S.-J. Yoon; S.K. Park; E.M. Calzado; L. Wang; B. Milian-Medina; L. Muccioli; D. Beljonne; P.G. Boj; M.A. Diaz-Garcia; R. Fischer; R. Resel; S. Casado; R. Wannemacher ...
Caràcter: Internacional
Congrés: 3rd European Symposium on Computing pi-Conjugated Compounds (CpiC3)
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
0	0	0,60	Sense valor

- 12_ **Codi:** 081284 **Tipus de participació:** Poster (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)
Any: 2012 **Títol:** Stimulated resonance raman scattering and laser oscillation in the monolithic molecular single crystal
Autors: S. Varghese; S.-J. Yoon; S.K. Park; E.M. Calzado; L. Wang; B. Milian-Medina; L. Muccioli; D. Beljonne; P.G. Boj; M.A. Diaz-Garcia; R. Fischer; R. Resel; S. Casado; R. Wannemacher; S.Y. Park; J. ...
Caràcter: Internacional
Congrés: 3rd European Symposium on Computing pi-Conjugated Compounds (CpiC3)
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
0	0	0,60	Sense valor

- 13_ **Codi:** 093574 **Tipus de participació:** Poster (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)
Any: 2012 **Títol:** Computational Design of Low Singlet-Triplet Gap All-Organic Molecules for OLED Application
Autors: B. Milian-Medina; J. Gierschner
Caràcter: Internacional
Congrés: 8th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA2012)
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
0	0	0,60	Sense valor

- 14_ **Codi:** 093575 **Tipus de participació:** Ponència (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)
Any: 2012 **Títol:** Tuning of Optical & Photophysical Properties in Organic Crystals
Autors: J. Gierschner; S. Varghese; S.-J. Yoon; S.K. Park; M.S. Kwon; E.M. Calzado; L. Wang; B. Milián-Medina; R. Wannemacher; D. Beljonne; P.G. Boj; M.A. Díaz-García; R. Fischer; R. Resel; S.Y. Park
Caràcter: Internacional
Congrés: 8th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA2012)
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
0	0	0,60	Sense valor

- 15_ **Codi:** 093576 **Tipus de participació:** Poster (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)
Any: 2012 **Títol:** Stimulated Emission and Related Phenomena in the Single Crystals of Dicyano-distyrylbenzene Derivatives
Autors: S. Varghese; S.-J. Yoon; R. Wannemacher; S. Casado; E.M. Calzado; P.G. Boj; M.A. Díaz-García; R. Resel; R. Fischer; B. Milián-Medina; S.Y. Park; J. Gierschner
Caràcter: Internacional
Congrés: EXCON12
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
0	0	0,60	Sense valor

- 16_ **Codi:** 093577 **Tipus de participació:** Ponència (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)
Any: 2012 **Títol:** Exciton Injection and Diffusion in Supramolecular Nanostructured Materials: Insights at the Nanoscale
Autors: Johannes Gierschner; Lucas Viani; Begoña Milián-Medina; Fabio Cuccinota; André Devaux; Luisa De Cola; Jérôme Cornil; David Beljonne; Hans-Joachim Egelhaaf
Caràcter: Internacional
Congrés: EXCON12
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
0	0	0,60	Sense valor

- 17_ **Codi:** 093579 **Tipus de participació:** Ponència invitada (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)
Any: 2012 **Títol:** Tuning of Optical & Photophysical Properties in Single Crystals of π -Conjugated Compounds
Autors: J. Gierschner; S. Varghese; S.-J. Yoon; S.K. Park; M.S. Kwon; E.M. Calzado; L. Wang; S. Casado; P.G. Boj; R. Fischer; B. Milián-Medina; M.A. Díaz-García; R. Resel; R. Wannemacher; D. Beljonne; S ...
Caràcter: Internacional
Congrés: Second International Meeting on Organic Materials for a Better Future (Futurmat2)
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada àmbit Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
0	0	0,60	Sense valor

- 18_ **Codi:** 112580 **Tipus de participació:** Poster (*MONZO MANSANET, ISIDRO; GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2013 **Títol:** ANÁLISIS DE INTERACCIONES PROTEÍNA-PROTEÍNA MEDIANTE DPI
Autors: D. Giménez-Romero, M.A. González-Martínez, J.L. López-Paz, I.S. Monzó, R. Puchades, A. Maquieira.
Caràcter: Internacional
Congrés: VII International Workshop on Sensors and Molecular Recognition
Publicació: LIBRO DE ARTICULOS (ISBN: 978-84-695-8811-6)
Classificació: Pòster a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
2,00	0,00	0,60	0.6

- 19_ **Codi:** 112582 **Tipus de participació:** Poster (*MONZO MANSANET, ISIDRO; GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2013 **Títol:** ELUCIDACIÓN DEL MECANISMO DE INTERACCIÓN MOLECULAR DE LA LECTINA ARTINM CON LA LÍNEA CELULAR NB4
Autors: D. Giménez-Romero, P.R. Bueno, I.S. Monzó, R. Puchades y A. Maquieira.
Caràcter: Internacional
Congrés: VII International Workshop on Sensors and Molecular Recognition
Publicació: LIBRO DE ARTICULOS (ISBN: 978-84-695-8811-6)
Classificació: Pòster a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
2,00	0,00	0,60	0.6

- 20_ **Codi:** 110749 **Tipus de participació:** Ponència invitada (*TOMAS VERT, FRANCISCO*)
Any: 2012 **Títol:** Presidents Forum : Facilitating the Integration of Confucius Institute in the Host University and the Local Communities
Autors: Tomás Vert, F
Caràcter: Internacional
Congrés: The 7th Confucius Institute Conference
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada àmbit Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
0	0	0,60	Sense valor

- 21_ **Codi:** 113146 **Tipus de participació:** Poster (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO)
Any: 2013 **Títol:** Theoretical determination of the kinetic isotope effects for the oxidative degradation of nitrobenzene catalyzed by nitrobenzene dioxygenase
Autors: A. Pabis, K. Swiderek, S. Martí, I. Tuñón, P. Paneth
Caràcter: Internacional
Congrés: Isotopes 2013
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
1,00	0,00	0,60	0.6

- 22_ **Codi:** 113149 **Tipus de participació:** Ponència invitada (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO)
Any: 2013 **Títol:** Protein Motions and Catalysis
Autors: I. Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: EMBO Workshop. Glycoproteins from structure to disease
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada àmbit Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
1,00	0,00	0,60	0.6

- 23_ **Codi:** 113150 **Tipus de participació:** Ponència invitada (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO)
Any: 2013 **Títol:** Heavy enzymes: a meeting point to discuss dynamical effects in catalysis
Autors: I. Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: Barcelona Biomed Conferences. Frontiers in dynamics simulations of biological molecules
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada àmbit Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
1,00	0,00	0,60	0.6

- 24_ **Codi:** 113251 **Tipus de participació:** Poster (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO)
Any: 2013 **Títol:** Theoretical studies of the peptide bond formation process
Autors: K. Swiderek, I. Tuñón, S. Martí, V. Moliner, J. Bertran
Caràcter: Internacional
Congrés: TheoBio
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
1,00	0,00	0,60	0.6

- 25_ **Codi:** 111131 **Tipus de participació:** Poster (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ARANDA MORATALLA, JUAN; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)
Any: 2013 **Títol:** Reaction mechanism and molecular dynamics analysis of M.Hhai C5-Cytosine-methyltransferase
Autors: J. Aranda, K. Zinovjev, K. Swiderek, M. Roca, I. Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: 9th European Conference on Computational Chemistry
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
3,00	0,00	0,60	0.6

26_ **Codi:** 111132 **Tipus de participació:** Poster (TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ARANDA MORATALLA, JUAN; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)

Any: 2013 **Títol:** Molecular dynamics and QM/MM free energy profiles of cytosine C5-methyltransferase M.Hhai

Autors: J. Aranda, K. Zinovjev, K. Swiderek, M. Roca, I. Tuñón

Caràcter: Internacional

Congrés: Federation of European Biochemical Societies Congress 2013

Publicació:

Classificació: Pòster a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
3,00	0,00	0,60	0.6

27_ **Codi:** 111133 **Tipus de participació:** Poster (TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ARANDA MORATALLA, JUAN; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)

Any: 2013 **Títol:** Molecular dynamics and QM/MM free energy profiles for Adenine-N6 Methylation by M.TaqI

Autors: J. Aranda, K. Zinovjev, M. Roca, I. Tuñón, F. J. Luque

Caràcter: Internacional

Congrés: Frontiers in Dynamics Simulations of Biological Molecules

Publicació:

Classificació: Pòster a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
3,00	0,00	0,60	0.6

28_ **Codi:** 106619 **Tipus de participació:** Comunicació (TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; GARCIA MESEGUER, RAFAEL)

Any: 2013 **Títol:** The role of protein structure, flexibility and dynamics in enzymatic catalysis of a SN2 reaction

Autors: Rafael García-Meseguer, Sergio Martí, J. Javier Ruiz-Pernía, Vicente Moliner, Iñaki Tuñón

Caràcter: Internacional

Congrés: European Conference on Computational Chemistry

Publicació:

Classificació: Comunicació a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
2,00	0,00	0,60	0.6

29_ **Codi:** 113145 **Tipus de participació:** Ponència (TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; GARCIA MESEGUER, RAFAEL)

Any: 2013 **Títol:** Simulations of heavy enzymes. Enzymatic isotope effects in the N23PP/S148A mutant of DHFR

Autors: I. Tuñón, R. García -Meseguer, J. Javier Ruiz-Pernía, V. Moliner

Caràcter: Internacional

Congrés: Isotopes 2013

Publicació:

Classificació: Ponència a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
2,00	0,00	0,60	0.6

30_ **Codi:** 113148 **Tipus de participació:** Ponència (TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; GARCIA MESEGUER, RAFAEL; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)

Any: 2013 **Títol:** Making Enzymes Heavier

Autors: I. Tuñón, R. García-Meseguer, J. Javier Ruiz-Lopez, M. Roca, S. Martí, V. Moliner

Caràcter: Internacional

Congrés: XXXIX International Conference Theoretical Chemists of Latin Expression

Publicació:

Classificació: Ponència a Congrés Internacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
3,00	0,00	0,60	0.6



- 31_ **Codi:** 113147 **Tipus de participació:** Ponència (TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)
Any: 2013 **Títol:** Computational studies of the role of protein motions in enzyme catalysis. Enzymatic isotope effects in wild type DHFR
Autors: V. Moliner, J. Javier Ruiz-Pernía, M. Roca, I. Tuñón, L.Y.P. Luk, W. M. Dawson, E. J. Loveridge, D. R. Glowacki, J. N. Harvey, A. J. Mulholland, R. K. Allemann
Caràcter: Internacional
Congrés: Isotopes 2013
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacional
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 2,00 | 0,00 | 0,60 | 0.6 |

- 32_ **Codi:** 112665 **Tipus de participació:** Poster (TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ZINOVJEVS, KIRILS)
Any: 2013 **Títol:** Simulation tools for automatic determination of enzymatic reaction mechanisms. Guanidinoacetate methyltransferase (GAMT) case
Autors: Kirill Zinovjev; Jose-Javier Ruiz-Pernía; Iñaki Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: Federation of European Biochemical Societies CONGRESS 2013 ¿Mechanisms in Biology¿
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 2,00 | 0,00 | 0,60 | 0.6 |

- 33_ **Codi:** 111087 **Tipus de participació:** Ponència invitada (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2013 **Títol:** Espectroelectroquímica y electrogravimetría en corriente alterna para el estudio de polímeros electrocrómicos.
Autors: J. Agrisuelas, J.J. Garcia-Jareño, F. Vicente
Caràcter: Nacional
Congrés: XXXIV Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química, XV Encontro Ibérico de Electroquímica y Jornada ISE (International Society of Electrochemistry)
Publicació: Libro de Resúmenes
Classificació: Ponència Invitada àmbit Nacional
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 3,00 | 0,00 | 0,30 | 0.3 |

- 34_ **Codi:** 111088 **Tipus de participació:** Comunicació (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2013 **Títol:** Intercambio de cationes durante la estabilización del Azul de Prusia
Autors: J. Agrisuelas, A. Castillo, C. Delgado, J.J. García-Jareño, C. Moreno, A. Roig, F. Vicente
Caràcter: Nacional
Congrés: XXXIV Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química, XV Encontro Ibérico de Electroquímica y Jornada ISE (International Society of Electrochemistry)
Publicació: Libro de Resúmenes
Classificació: Comunicació a Congrés Nacional
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 3,00 | 0,00 | 0,30 | 0.3 |

- 35_ **Codi:** 111089 **Tipus de participació:** Comunicació (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2013 **Títol:** Espectroelectroquímica cíclica y electrogravimetría-ac para la caracterización de películas finas de poli-(toluidina) en medio ácido.
Autors: J. Agrisuelas, C. Gabrielli, J.J. Garcia-Jareño, H. Perrot, F. Vicente
Caràcter: Nacional
Congrés: XXXIV Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química, XV Encontro Ibérico de Electroquímica y Jornada ISE (International Society of Electrochemistry)
Publicació: Libro de Resúmenes
Classificació: Comunicació a Congrés Nacional
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 3,00 | 0,00 | 0,30 | 0.3 |

36_ **Codi:** 111090 **Tipus de participació:** Comunicació (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)

Any: 2013 **Títol:** Corrosión de composites Grafito+EVA+Aluminio

Autors: J. Agrisuelas, J.V. Armijo, M. Buaki, J.J. García-Jareño, J. Navarro-Laboulais, F. Vicente

Caràcter: Nacional

Congrés: XXXIV Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química, XV Encontro Ibérico de Electroquímica y Jornada ISE (International Society of Electrochemistry)

Publicació: Libro de Resúmenes

Classificació: Comunicació a Congrés Nacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
3,00	0,00	0,30	0.3

37_ **Codi:** 111091 **Tipus de participació:** Comunicació (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)

Any: 2013 **Títol:** Corrosión forzada de un composite Grafito+EVA+Zn.

Autors: J. Agrisuelas, J.J. García-Jareño, M. Piedras, C. Sanz, F. Vicente.

Caràcter: Nacional

Congrés: XXXIV Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química, XV Encontro Ibérico de Electroquímica y Jornada ISE (International Society of Electrochemistry)

Publicació: Libro de Resúmenes

Classificació: Comunicació a Congrés Nacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
3,00	0,00	0,30	0.3

38_ **Codi:** 111092 **Tipus de participació:** Comunicació (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)

Any: 2013 **Títol:** Caracterización espectroelectroquímica del poli-(rojo neutro)

Autors: Jerónimo Agrisuelas, José Juan García-Jareño, Rafael Rodríguez-Amaro, José M. Rodríguez-Mellado, Gabriel Sancho, Francisco Vicente

Caràcter: Nacional

Congrés: XXXIV Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química, XV Encontro Ibérico de Electroquímica y Jornada ISE (International Society of Electrochemistry)

Publicació: Libro de Resúmenes

Classificació: Comunicació a Congrés Nacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
3,00	0,00	0,30	0.3

39_ **Codi:** 111093 **Tipus de participació:** Poster (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)

Any: 2013 **Títol:** Voltamperometría de disoluciones ácidas de Fe³⁺ y Zn²⁺

Autors: J. Agrisuelas, J. Beleña, J.J. García-Jareño, M. Piedras, E. Pozo, F. Vicente

Caràcter: Nacional

Congrés: XXXIV Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química, XV Encontro Ibérico de Electroquímica y Jornada ISE (International Society of Electrochemistry)

Publicació: Libro de Resúmenes

Classificació: Pòster a Congrés Nacional

<i>PDI Dept.</i>	<i>PDI Altres</i>	<i>Pts GREC</i>	<i>Pts FIU</i>
3,00	0,00	0,30	0.3

- 40_ **Codi:** 111094 **Tipus de participació:** Poster (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2013 **Títol:** Análisis espectroelectroquímico del poli-(azul de metileno)
Autors: J. Agrisuelas, S. Crippa, A. Figini, J. J. García-Jareño, F. Vicente
Caràcter: Nacional
Congrés: XXXIV Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química, XV Encontro Ibérico de Electroquímica y Jornada ISE (International Society of Electrochemistry)
Publicació: Libro de Resúmenes
Classificació: Pòster a Congrés Nacional
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 3,00 | 0,00 | 0,30 | 0,3 |
-
- 41_ **Codi:** 111095 **Tipus de participació:** Comunicació (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2013 **Títol:** ÉTUDE PAR TECHNIQUES ELECTRO-GRAVIMETRIQUES ET ELECTRO-SPECTROSCOPIQUES IN SITU DES COUCHES MINCES DE POLY(O-TOLUIDINE) DEPOSE SUR L'ELECTRODE D'OR.
Autors: J. AGRISUELAS, C. GABRIELLI, J.J. GARCIA-JAREÑO, H. PERROT, F. VICENTE
Caràcter: Internacional
Congrés: 24ème Forum sur les Impédances Electrochimiques
Publicació: Libro de Resúmenes del congreso
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 3,00 | 0,00 | 0,60 | 0,6 |
-
- 42_ **Codi:** 111096 **Tipus de participació:** Comunicació (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2013 **Títol:** ÉTUDE PAR TECHNIQUES ELECTROGRAVIMETRIQUES ET ELECTROSPECTROSCOPIQUES DES COUCHES DE JAUNE DE PRUSSE
Autors: J. AGRISUELAS, C. DELGADO, J.J. GARCIA-JAREÑO, C. MORENO, F. VICENTE
Caràcter: Internacional
Congrés: 24ème Forum sur les Impédances Electrochimiques
Publicació: Libro de Resúmenes del congreso
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 3,00 | 0,00 | 0,60 | 0,6 |
-
- 43_ **Codi:** 111097 **Tipus de participació:** Comunicació (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2013 **Títol:** ELECTRO-GRAVIMETRIE ET ELECTRO-SPECTROSCOPIE DU BLEU DE PRUSSE AVEC AMMONIUM
Autors: J. AGRISUELAS, C. DELGADO, C. GABRIELLI, J.J. GARCIA-JAREÑO, H. PERROT, F. VICENTE
Caràcter: Internacional
Congrés: 24ème Forum sur les Impédances Electrochimiques
Publicació: Libro de Resúmenes del congreso
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 3,00 | 0,00 | 0,60 | 0,6 |
-
- 44_ **Codi:** 112664 **Tipus de participació:** Poster (*ZINOVJEVS, KIRILS*)
Any: 2012 **Títol:** Collective variable for rapid investigation of enzymatic reactivity
Autors: Kirill Zinovjev; Sergio Martí; Iñaki Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: 8th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA)
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
- | <i>PDI Dept.</i> | <i>PDI Altres</i> | <i>Pts GREC</i> | <i>Pts FIU</i> |
|------------------|-------------------|-----------------|----------------|
| 0 | 0 | 0,60 | Sense valor |