

Memòria 2014

Ajuda 

Any de Memòria  Departament/Institut    
 Tipus Producció  

**QUÍMICA FÍSICA****2 Capítols de Llibres i altres publicacions**

Memòria sense avaluar Definitiva

**Capítols de Llibres i altres publicacions**

1- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
061326	3,00	0,00

**FITXA DE L'OUTPUT**Codi: 061326 Clau: Capítol de llibre (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA*)

Any: 2014 Títol: Basic Concepts and Applications of Molecular Topology to Drug Design (Chapter 8)

Autors: Jorge Gálvez; María Gálvez-Llompарт; Ramón García-Domenech

Llibre: Advances In Mathematical Chemistry and Applications

ISBN:

Classificació: Capítol de llibre

2- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
062299	1,00	0,00

**FITXA DE L'OUTPUT**Codi: 062299 Clau: Altres (*GARCIA LOPERA, ROSA*)

Any: 2014 Títol: Some science teaching styles in different college faculties in the spanish universities

Autors: M. C. Martínez-Tomás; M.P. Utrillas; S. Agouram; J. L. Cruz; V. Muñoz-Sanjosé; J. Pellicer Porres; C. Roldán García; C. Coll Company; J. A. Martínez-Lozano; F. Tena Sanguesa; S. Gandía Franco; J ...


Llibre: Proceedings of 7th International Conference of Education, Research and Innovation, ICERI 2014.

ISBN: 978-84-617-2484-0

Classificació: Altres

Més informació: grec@uv.es

Memòria 2014

Ajuda 

Any de Memòria: 2014    Departament/Institut: QUÍMICA FÍSICA   

Típus Producció: Llibres de CC i Publicacions Multimèdia    

**QUÍMICA FÍSICA****1 Llibres de CC i Publicacions Multimèdia**

Memòria sense avaluar Definitiva

**Llibres de CC i Publicacions Multimèdia**

1-	Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
	062298	1,00	0,00
<b>FITXA DE L'OUTPUT</b>			
Codi: 062298 Clau: Llibre de contingut científic ( <i>GARCIA LOPERA, ROSA</i> )			
Any: 2014 Títol: Factores que afectan a la Cromatografía de Exclusión Molecular de (bio)polielectrolitos			
Autors: Rosa García Lopera			
ISBN: 978-84-370-1021-2			
Editorial:			
Classificació: Llibre			

Més informació: [grec@uv.es](mailto:grec@uv.es)

Memòria 2014

Ajuda 

Any de Memòria | 2014 ; Departament/Institut | QUÍMICA FÍSICA ; |

Tipus Producció | Artícles en Revistes

## QUÍMICA FÍSICA

### 35 Artícles en Revistes

Memòria sense avaluar Definitiva

#### Artícles en Revistes

1-	Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
	099444	1,00	0,00
	<b>FITXA DE L'OUTPUT</b>		
	Codi: 099444 Clau: Article ( <i>AGRISUELAS VALLES, JERONIMO</i> )		
	Any: 2014 Autors: C. Benmouhoub; J. Agrisuelas; N. Benbrahim; F. Pillier; C. Gabrielli; A. Kadri; A. Palleret; H. Perrot; O. Sel		
	Títol: Influence of the Incorporation of CeO <sub>2</sub> Nanoparticles on the Ion Exchange Behavior of Dodecylsulfate Doped Polypyrrole Films: Ac-Electrogravimetry Investigations		
	Revista: 901127 - Electrochimica Acta		
	Informació addicional: Volum: 145 Número: - Pàgina Inicial: 270 Pàgina final: 280 Data de publicació: 2014		
	Classificació: Article ISI al 1er quartil		
2-	Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
	105910	0	0
	<b>FITXA DE L'OUTPUT</b>		
	Codi: 105910 Clau: Article ( <i>CELDA MUÑOZ, BERNARDO</i> )		
	Any: 2013 Autors: Vicente JI, Fuster-García E, Tortajada S, García-Gómez JM, Davies N, Natarajan K, Wilson M, Grundy RG, Wesseling P, Monteón D, Celda B, Robles M, Peet AC.		
	Títol: Accurate classification of childhood brain tumours by in vivo <sup>1</sup> H MRS - a multi-centre study.		
	Revista: 902837 - European Journal of Cancer		
	Informació addicional: Volum: Feb49(3) Número: Pàgina Inicial: 658 Pàgina final: Data de publicació: 2013		
	Classificació: Article ISI al 1er quartil		
3-	Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
	105911	1,00	0,00
	<b>FITXA DE L'OUTPUT</b>		
	Codi: 105911 Clau: Article ( <i>CELDA MUÑOZ, BERNARDO</i> )		
	Any: 2014 Autors: Martínez-Granados B, Martínez-Bisbal MC, Sanjuan J, Aguilar EJ, Martí-Bonmati L, Molla E, Celda B		
	Títol: Study of the Inferior colliculus in patients with schizophrenia by magnetic resonance spectroscopy		
	Revista: 910492 - Revista de Neurologia		
	Informació addicional: Volum: Jul 1;59(1) Número: 59(1) Pàgina Inicial: 1 Pàgina final: 7 Data de publicació: 01/07/2014		
	Classificació: Article SCOPUS at Q3		
4-	Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
	105912	1,00	0,00
	<b>FITXA DE L'OUTPUT</b>		
	Codi: 105912 Clau: Article ( <i>CELDA MUÑOZ, BERNARDO</i> )		
	Any: 2014 Autors: Esteve V, Berganzo J, Monge R, Martínez-Bisbal MC, Villa R, Celda B, Fernandez L.		
	Títol: Development of a three-dimensional cell culture system based on microfluidics for nuclear magnetic resonance and optical monitoring.		
	Revista: 913597 - Biomicrofluidics		
	Informació addicional: Volum: Nov 18;8(6):064 Número: 8(6) Pàgina Inicial: 064105-1 Pàgina final: 064105-11 Data de publicació: 11/2014		
	Classificació: Article ISI al 1er quartil		
5-	Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
	099531	1,00	0,00
	<b>FITXA DE L'OUTPUT</b>		
	Codi: 099531 Clau: Article ( <i>GALVEZ ALVAREZ, JORGE</i> )		
	Any: 2014 Autors: Jun Wang; David Land; Kenjiro Ono; Jorge Galvez; Wei Zhao; Prashant Vempati; John W. Steele; Alice Cheng; Masahito Yamada; Samara Levine; Paolo Mazzola; Giulio M. Pasnetti		
	Títol: Molecular Topology as Novel Strategy for Discovery of Drugs with Ab Lowering and Anti-Aggregation Dual Activities for Alzheimer's Disease		
	Revista: 915133 - Plos One		
	Informació addicional: Volum: 09 Número: 3 Pàgina Inicial: 1 Pàgina final: 7 Data de publicació: 26/03/2014		
	Classificació: Article ISI al 1er quartil		
6-	Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
	099533	2,00	0,00
	<b>FITXA DE L'OUTPUT</b>		
	Codi: 099533 Clau: Article ( <i>GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GALVEZ LLOMPART, MARIA</i> )		
	Any: 2014 Autors: Laura Caboni; María Galvez-Llompert; Jorge Galvez; Fernando Blanco; Jaime Rubio-Martínez; Darren Fayne; David Lloyd		
	Títol: Molecular topology applied to the discovery of 1-benzyl-2- (3-fluorophenyl)-4-hydroxy-3- (3-phenylpropanoyl)-2Hpyrrol- 5-one as a non-fligand binding pocket anti-androgen		
	Revista: 913199 - Journal Of Chemical Information And Modeling		
	Informació addicional: Volum: 54 Número: 10 Pàgina Inicial: 2953 Pàgina final: 2966 Data de publicació: 18/09/2014		
	Classificació: Article ISI al 1er quartil		
7-	Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
	099529	3,00	0,00
	<b>FITXA DE L'OUTPUT</b>		

NO SE PUDO  
INCLUIR EN  
MEMORIA  
2013

Codi: 099529 Clau: Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA*)  
 Any: 2014 Autors: María Ángeles Martínez Rodríguez; Raimundo J Seguí López-Peñalver; Gemma Alcácer Tomás; Jorge Gálvez Álvarez; María Gálvez-Llompart; Ramón García-Domenech  
 Títol: Aplicación de la topología molecular a la predicción y optimización de la actividad repelente de mosquitos de derivados de la N-acylperlipridina  
 Revista: 309784 - Nereis  
 Informació adicional: Volum: 6 Número: Pàgina Inicial: 19 Pàgina final: 26Data de publicació: 30/03/2014  
 Classificació: Article a Revista amb Comitè de selecció

8- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
099532	3,00	0,00

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 099532 Clau: Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA; ZANNI, RICCARDO*)  
 Any: 2014 Autors: Zanni, Riccardo; Galvez-Llompart, Maria; Galvez, Jorge; Garcia-Domenech, Ramon  
 Títol: QSAR Multi-Target In Drug Discovery; A Review  
 Revista: 914583 - Current Computer-Aided Drug Design  
 Informació adicional: Volum: 10 Número: 2 Pàgina Inicial: 129 Pàgina final: 136Data de publicació: 2014  
 Classificació: Article ISI al 1er quartil

9- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
099528	1,00	0,00

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 099528 Clau: Article (*GARCIA DOMENECH, RAMON*)  
 Any: 2014 Autors: Miriam A. Marbíns Alho; Yovaní Marrero-Ponce; Stephen J. Barigye; Alfredo Meneses-Marcel; Yanetsy Machado Tugores; Alina Montero-Torres; Alicia Gómez-Barrio; Juan J. Nogal; Rory N. García-Sánchez ...  
 Títol: Antiprotozoan lead discovery by aligning dry and wet screening: Prediction, synthesis, and biological assay of novel quinoxalines  
 Revista: 909154 - Bioorganic & Medicinal Chemistry  
 Informació adicional: Volum: 22 Número: Pàgina Inicial: 1568 Pàgina final: 1585Data de publicació: 31/01/2014  
 Classificació: Article ISI al 2on quartil

10- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
099530	2,00	0,00

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 099530 Clau: Article (*GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA; ZANNI, RICCARDO*)  
 Any: 2014 Autors: J. Vicente de Julián-Ortiz; Riccardo Zanni; María Gálvez-Llompart; Ramón García-Domenech  
 Títol: The prediction of human intestinal absorption based on the molecular structure.  
 Revista: 910845 - Current Drug Metabolism  
 Informació adicional: aceptado y publicado online Volum: 15 Número: 4 Pàgina Inicial: 380 Pàgina final: 388Data de publicació: 2014  
 Classificació: Article ISI al 1er quartil

11- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
101705	1,00	0,00

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 101705 Clau: Article (*GARCIA LOPERA, ROSA*)  
 Any: 2014 Autors: R. García-Lopera; M.L. Calatayud; J. Hernández  
 Títol: A brief review on the contribution to the knowledge of the difficulties and misconceptions in understanding the chemical equilibrium.  
 Revista: 314013 - Asian Journal of Education and e-Learning  
 Informació adicional: Volum: 2 Número: 06 Pàgina Inicial: 448 Pàgina final: 463Data de publicació: 01/12/2014  
 Classificació: Article a Revista amb Comitè de selecció

12- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
103250	2,00	0,00

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 103250 Clau: Article (*GARCIA MESEGUER, RAFAEL; ZINOVJEVS, KIRILS*)  
 Any: 2014 Autors: Rafael García-Meseguer; Kiril Zinovjev; Malte Roca; Javier Jose Ruiz-Pernla; Iñaki Tuñón  
 Títol: Linking Electrostatic Effects and Protein Motions in Enzymatic Catalysis. A Theoretical Analysis of Catechol O-Methyltransferase  
 Revista: 909613 - Journal of Physical Chemistry B  
 Informació adicional: Volum: 119 Número: 3 Pàgina Inicial: 873 Pàgina final: 882Data de publicació: 27/08/2014  
 Classificació: Article SCOPUS al Q1

13- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
101027	1,00	0,00

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 101027 Clau: Article (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)  
 Any: 2014 Autors: Jorge Esconhuela, Miguel Ángel González-Martínez, José Luis López-Paz, Rosa Puchades, Ángel Maquieira and David Gimenez-Romero  
 Títol: Dual-Polarization Interferometry: A Novel Technique To Light up the Nanomolecular World  
 Revista: 900636 - Chemical Reviews  
 Informació adicional: Volum: 115 Número: Pàgina Inicial: 265 Pàgina final: 294Data de publicació: 02/12/2014  
 Classificació: Article ISI al 1er quartil

14- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
080147	0	0

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 080147 Clau: Article (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)  
 Any: 2013 Autors: Antonio Cardone; Carmela Martinelli; María Losurdo; Elena Dilonardo; Giovanni Bruno; Guldo Scavia; Silvia Destri; Pinalysa Cosma; Luigi Salamandra; Andrea Reale; Aldo Di Carlo; Aranzazu Aguirre ...  
 Títol: Fluoro-Functionalization of Vinylene Units in a Polyarylenevinylene for Polymer Solar Cells: Impact of Fluorination on Morphological and Optical Properties and on Photovoltaic Performances.  
 Revista: 908028 - Journal of Materials Chemistry  
 Informació adicional: Journal of Materials Chemistry A Volum: 1 Número: Pàgina Inicial: 715 Pàgina final: 727Data de publicació: 2013  
 Classificació: Article ISI al 1er quartil

15- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
103578	0	0

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 103578 Clau: Article (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)  
 Any: 2013 Autors: Johannes Gierschner; Larry Lüer; Begoña Millán-Medina; Dieter Oelkrug; Hans-Joachim Egelhaaf  
 Títol: Highly Emissive H-Aggregates or Aggregation-Induced Emission Quenching? The Photophysics of All-Trans Paradistyrylbenzene  
 Revista: 916028 - Journal Of Physical Chemistry Letters  
 Informació adicional: Volum: 4 Número: Pàgina Inicial: 2686 Pàgina final: 2697Data de publicació: 2013  
 Classificació: Article ISI al 1er quartil

16- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
----------	---------------	-----------------

X-RESPONDE  
- 2015

2013

103579 0 0

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 103579 Clau: Article (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)  
 Any: 2013 Autors: Michael Wykes; Begoña Millán-Medina; Johannes Gierschner  
 Títol: Computational engineering of low bandgap copolymers  
 Revista: 314058 - Frontiers In Chemistry  
 Informació addicional: Volum: 1 Número: 35 Pàgina Inicial: 1 Pàgina final: 12 Data de publicació: 2013  
 Classificació: Article a Revista amb Comitè de selecció

2013

17- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
103580	1,00	0,00

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 103580 Clau: Article (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)  
 Any: 2014 Autors: Pawel Nita; Carlos Pimentel; Feng Luo; Begoña Millán-Medina; Johannes Gierschner; Carlos M. Pina; Enrico Gnecco  
 Títol: Molecular resolution friction microscopy of Cu phthalocyanine thin films on dolomite (104) in water  
 Revista: 916456 - Nanoscale  
 Informació addicional: Volum: 6 Número: Pàgina Inicial: 8334 Pàgina final: 8339 Data de publicació: 2014  
 Classificació: Article ISI al 1er quartil

18- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
103581	0	0

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 103581 Clau: Article (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)  
 Any: 2013 Autors: Shinto Varghese; Sang Kyu Park; Santiago Casado; Roland C. Fischer; Roland Resel; Begoña Millán-Medina; Reinhold Wannemacher; Soo Young Park; Johannes Gierschner  
 Títol: Stimulated Emission Properties of Sterically Modified Distyrylbenzene-Based H-Aggregate Single Crystals  
 Revista: 916028 - Journal Of Physical Chemistry Letters  
 Informació addicional: Volum: 4 Número: Pàgina Inicial: 1597 Pàgina final: 1602 Data de publicació: 2013  
 Classificació: Article ISI al 1er quartil

2013

19- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
103582	1,00	0,00

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 103582 Clau: Article (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)  
 Any: 2014 Autors: Fabio Cucinotta; Aurélie Guenet; Claudia Bizzarri; Wojciech Mróz; Chiara Botta; Begoña Millán-Medina; Johannes Gierschner; Luisa De Cola  
 Títol: Energy Transfer at the Zeolite L Boundaries: Towards Photo- and Electroresponsive Materials  
 Revista: 917523 - Chempluschem  
 Informació addicional: Volum: 79 Número: Pàgina Inicial: 45 Pàgina final: 47 Data de publicació: 2014  
 Classificació: Article ISI al 2on quartil

20- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
103583	1,00	0,00

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 103583 Clau: Article (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)  
 Any: 2014 Autors: Min Sang Kwon; Geunseok Jang; David Bilby; Begoña Millán-Medina; Johannes Gierschner; Taek Seung Lee; Jinsang Kim  
 Títol: Design Principles of Chemiluminescence (CL) Chemodosimeter for Self-Signaling Detection: Luminal Protective Approach  
 Revista: 917082 - Rsc Advances  
 Informació addicional: Volum: 4 Número: Pàgina Inicial: 46488 Pàgina final: 46493 Data de publicació: 2014  
 Classificació: Article ISI al 1er quartil

21- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
104490	1,00	0,00

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 104490 Clau: Article (*PEREZ GIMENEZ, FACUNDO*)  
 Any: 2014 Autors: Stephen J. Barigye; Yovani Marrero-Ponce; Facundo Pérez-Giménez; Danail Bonchev  
 Títol: Trends in information theory-based chemical structure codification  
 Revista: 909338 - Molecular Diversity  
 Informació addicional: Volum: 18 Número: Pàgina Inicial: 673 Pàgina final: 686 Data de publicació: 05/04/2014  
 Classificació: Article ISI al 1er quartil

22- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
104491	1,00	0,00

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 104491 Clau: Article (*PEREZ GIMENEZ, FACUNDO*)  
 Any: 2014 Autors: Oscar Martínez-Santiago; Reisel Millan-Cabrera; Yovani Marrero-Ponce; Stephen J. Barigye; Yoan Martínez-Lopez; Francisco Torrens; Facundo Perez-Gimenez  
 Títol: Discrete Derivatives for Atom-Pairs as a Novel Graph-Theoretical Invariant for Generating New Molecular Descriptors: Orthogonality, Interpretation and QSARs/QSPRs on Benchmark Databases  
 Revista: 916143 - Molecular Informatics  
 Informació addicional: Volum: 33 Número: Pàgina Inicial: 343 Pàgina final: 368 Data de publicació: 2014  
 Classificació: Article ISI al 2on quartil

23- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
104492	1,00	0,00

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 104492 Clau: Article (*PEREZ GIMENEZ, FACUNDO*)  
 Any: 2014 Autors: Gerardo M. Casañola-Martín; Huong Le-Thi-Thu; Yovani Marrero-Ponce; Juan A. Castillo-Garit; Francisco Torrens; Facundo Perez-Gimenez; Concepción Abad  
 Títol: Analysis of Proteasome Inhibition Prediction Using Atom-Based Quadratic Indices Enhanced by Machine Learning Classification Techniques  
 Revista: 913841 - Letters In Drug Design & Discovery  
 Informació addicional: Volum: 11 Número: Pàgina Inicial: 705 Pàgina final: 711 Data de publicació: 2014  
 Classificació: Article SCOPUS al Q2

24- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
104493	1,00	0,00

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 104493 Clau: Article (*PEREZ GIMENEZ, FACUNDO*)  
 Any: 2014 Autors: Miriam A. Martins Alho; Yovani Marrero-Ponce; Stephen J. Barigye; Alfredo Meneses-Marcel; Yanetsy Machado Tugores; Alina Montero-Torres; Alicia Gómez-Barrio; Juan J. Nogal; Rory N. García-Sánchez; María ...  
 Títol: Antiprotozoan lead discovery by aligning dry and wet screening: Prediction, synthesis, and biological assay of novel quinoxalinones  
 Revista: 909154 - Bioorganic & Medicinal Chemistry  
 Informació addicional: Volum: 22 Número: Pàgina Inicial: 1558 Pàgina final: 1585 Data de publicació: 31/01/2014

Classificació: Article ISI al 2on quartil

25- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
094888	1,00	0,00
<b>FITXA DE L'OUTPUT</b>		
Codi: 094888 Clau: Article ( <b>TEJERO TOQUERO, ROBERTO</b> )		
Any: 2014 Autors: Binchen Mao; Roberto Tejero; David Baker; Gaetano T. Montelione		
Títol: Protein NMR Structures Refined with Rosetta Have Higher Accuracy Relative to Corresponding X-ray Crystal Structures		
Revista: 900665 - Journal of the American Chemical Society		
Informació addicional: Volum: 136 Número: Pàgina inicial: 1893 Pàgina final: 1906 Data de publicació: 06/01/2014		
Classificació: Article ISI al 1er quartil		
26- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
100384	1,00	2,00
<b>FITXA DE L'OUTPUT</b>		
Codi: 100384 Clau: Article ( <b>TEJERO TOQUERO, ROBERTO</b> )		
Any: 2014 Autors: F. Olmo, M. P. Clares, C. Marín, J. Gonzalez, M. Inclán, C. Soriano, K. Urbanová, R. Tejero, J. M. Rosales, R. L. Krauth-Siegel, M. Sánchez-Moreno, E. García-España.		
Títol: Synthetic single and double aza-scorpand macrocycles act as inhibitors of the antioxidant enzymes iron superoxide dismutase and trypanothione reductase in Trypanosoma cruzi with promising results in a murine model.		
Revista: 917082 - Rsc Advances		
Informació addicional: RSC Advances. DOI: 10.1039/C4RA09866H Volum: 4 Número: Pàgina inicial: 65108 Pàgina final: 65120 Data de publicació: 2014		
Classificació: Article ISI al 1er quartil		
27- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
104092	1,00	0,00
<b>FITXA DE L'OUTPUT</b>		
Codi: 104092 Clau: Article ( <b>TUÑÓN GARCÍA DE VICUÑA, IGNACIO NILO</b> )		
Any: 2014 Autors: L. Y. P. Luk, J. J. Ruiz-Pernía, W. H. Dawson, E. J. Loveridge, I. Tuñón, V. Moliner, R. K. Allemann		
Títol: Protein Isotope Effects in Dihydrofolate Reductase From Geobacillus stearothermophilus Show Entropic-Enthalpic Compensatory Effects on the Rate Constant		
Revista: 900665 - Journal of the American Chemical Society		
Informació addicional: Volum: 136 Número: 49 Pàgina inicial: 17317 Pàgina final: 17323 Data de publicació: 20/12/2014		
Classificació: Article ISI al 1er quartil		
28- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
104093	1,00	0,00
<b>FITXA DE L'OUTPUT</b>		
Codi: 104093 Clau: Article ( <b>TUÑÓN GARCÍA DE VICUÑA, IGNACIO NILO</b> )		
Any: 2014 Autors: K. Swiderek, J. J. Ruiz-Pernía, V. Moliner, I. Tuñón		
Títol: Heavy enzymes - experimental and computational insights in enzyme dynamics		
Revista: 909464 - Current Opinion in Chemical Biology		
Informació addicional: Volum: 21 Número: Pàgina inicial: 11 Pàgina final: 18 Data de publicació: 01/07/2014		
Classificació: Article ISI al 1er quartil		
29- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
104094	1,00	0,00
<b>FITXA DE L'OUTPUT</b>		
Codi: 104094 Clau: Article ( <b>TUÑÓN GARCÍA DE VICUÑA, IGNACIO NILO</b> )		
Any: 2014 Autors: K. Swiderek, I. Tuñón, V. Moliner		
Títol: Predicting enzymatic reactivity: from theory to design		
Revista: 916969 - Wiley Interdisciplinary Reviews-Computational Molecular Science		
Informació addicional: Volum: 4 Número: 5 Pàgina inicial: 407 Pàgina final: 421 Data de publicació: 01/07/2014		
Classificació: Article ISI al 1er quartil		
30- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
101857	3,00	0,00
<b>FITXA DE L'OUTPUT</b>		
Codi: 101857 Clau: Article ( <b>TUÑÓN GARCÍA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ARANDA MORATALLA, JUAN; ROCA MOLINER, MARIA TERESA</b> )		
Any: 2014 Autors: J. Aranda; N. M. F. S. A. Cerqueira; P. A. Fernandes; M. Roca; I. Tuñón; M. J. Ramos		
Títol: The Catalytic Mechanism of Carboxylesterases: A Computational Study		
Revista: 900239 - Biochemistry		
Informació addicional: Volum: 53 Número: 36 Pàgina inicial: 5820 Pàgina final: 5829 Data de publicació: 07/08/2014		
Classificació: Article SCOPUS al Q1		
31- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
103251	4,00	0,00
<b>FITXA DE L'OUTPUT</b>		
Codi: 103251 Clau: Article ( <b>TUÑÓN GARCÍA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ARANDA MORATALLA, JUAN; ROCA MOLINER, MARIA TERESA; ZINOVJEVS, KIRILS</b> )		
Any: 2014 Autors: Juan Aranda; Kiril Zinovjev; Maite Roca; Iñaki Tuñón		
Títol: Dynamics and Reactivity in Thermus aquaticus N6-Adenine Methyltransferase		
Revista: 900665 - Journal of the American Chemical Society		
Informació addicional: Volum: 135 Número: 46 Pàgina inicial: 16227 Pàgina final: 16239 Data de publicació: 27/10/2014		
Classificació: Article ISI al 1er quartil		
32- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
103249	2,00	0,00
<b>FITXA DE L'OUTPUT</b>		
Codi: 103249 Clau: Article ( <b>TUÑÓN GARCÍA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ZINOVJEVS, KIRILS</b> )		
Any: 2014 Autors: Kiril Zinovjev; Iñaki Tuñón		
Títol: Exploring chemical reactivity of complex systems with path-based coordinates: Role of the distance metric		
Revista: 900660 - Journal of Computational Chemistry		
Informació addicional: Volum: 35 Número: 23 Pàgina inicial: 1672 Pàgina final: 1681 Data de publicació: 01/07/2014		
Classificació: Article ISI al 1er quartil		
33- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
093372	3,00	0,00
<b>FITXA DE L'OUTPUT</b>		
Codi: 093372 Clau: Article ( <b>VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN</b> )		
Any: 2014 Autors: J. Agrisuelas, C. Gabrielli, J. J. García-Jareño, H. Perrot and F. Vicente		
Títol: Effects of anions size on the redox behavior of poly(o-toluidine) in acid solutions. An In situ vis-NIR cyclic spectroelectrogravimetry study		
Revista: 901127 - Electrochimica Acta		

Informació addicional: Volum: 125 Número: - Pàgina Inicial: 83 Pàgina final: 93 Data de publicació: 2014  
 Classificació: Article ISI al 1er quartil

34- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
095559	3,00	0,00

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 095559 Clau: Article (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)

Any: 2014 Autors: J. Agrisuelas, C. Gabrielli, J.J. García-Jareño, H. Perrot and F. Vicente

Títol: Effects of anion size on the electrochemical behavior of H2SO4-structured poly(o-toluidine) films. An ac-electrogravimetry study in acid solutions

Revista: 901127 - Electrochimica Acta

Informació addicional: Volum: 132 Número: - Pàgina Inicial: 561 Pàgina final: 573 Data de publicació: 2014

Classificació: Article ISI al 1er quartil

35- Codi	PDI del Dept.	Altres PDI UVEG
098820	3,00	0,00

**FITXA DE L'OUTPUT**

Codi: 098820 Clau: Article (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)

Any: 2014 Autors: J. Agrisuelas; J.J. García-Jareño; C. Moreno; F. Vicente

Títol: Correction of mass drift in ac-electrogravimetry of Prussian Yellow films. Mass impedance under apparently non-steady state condition

Revista: 901127 - Electrochimica Acta

Informació addicional: Volum: 138 Número: - Pàgina Inicial: 200 Pàgina final: 209 Data de publicació: 2014

Classificació: Article ISI al 1er quartil

Més informació: grec@uv.es

**Participació en Congressos i Reunions Científiques**

- 1- **Codi:** 119824 **Tipus de participació:** Comunicació (GALVEZ ALVAREZ, JORGE)  
**Any:** 2014 **Títol:** Oportunidades de aplicación de métodos in silico basados en topología molecular  
**Autors:** Jorge Galvez  
**Caràcter:** Nacional  
**Congrés:** Jornada-Taller: 'Oportunidades de financiación en Bioeconomía: Programa CIEN y otras oportunidades CDTI'  
**Publicació:**  
**Classificació:** Comunicació a Congrés Nacional

---

- 2- **Codi:** 111129 **Tipus de participació:** Comunicació (GARCIA LOPERA, ROSA)  
**Any:** 2014 **Títol:** L'ensenyament de les ciències en els nous Graus universitaris: algunes característiques dels estudiants i de les estratègies docents dels professors  
**Autors:** M.C. Martínez, V. Aguilera, A. Alcaraz, A. Andrio, J.P. Diaz, V. Estellés, F.J. Exposito, M.E. Torres, V. Gomez, I.E. Guillen, P. Ramirez, F.J. Manjón, J.M. Meseguer, J. Riera, I. Salinas, A. Vidaurre ...  
**Caràcter:** Nacional  
**Congrés:** V Trobades d'Innovació Educativa  
**Publicació:** Abstract en Actas del Congreso  
**Classificació:** Comunicació a Congrés Nacional

---

- 3- **Codi:** 111474 **Tipus de participació:** Poster (GARCIA LOPERA, ROSA)  
**Any:** 2014 **Títol:** Cursos de nivel para alumnos de primer curso de los grados en Ingeniería: Bases de matemáticas, física y química  
**Autors:** J. Delegido, R. García-Lopera, M. J. Hernández, P. Marzal, M. L. Pedro-Ferrer y L. Sanus  
**Caràcter:** Nacional  
**Congrés:** II Congreso de Innovación Docente en Ingeniería Química  
**Publicació:** II Congreso de Innovación Docente en Ingeniería Química (ISBN: 978-84-370-9271-3)  
**Classificació:** Pòster a Congrés Nacional

---

- 4- **Codi:** 113110 **Tipus de participació:** Comunicació (GARCIA LOPERA, ROSA)  
**Any:** 2014 **Títol:** Zapping en el aula: ¿se puede motivar con un click?  
**Autors:** R. García-Lopera  
**Caràcter:** Nacional  
**Congrés:** II Congreso de Innovación Docente en Ingeniería Química  
**Publicació:** ISBN-13: 978-84-370-9271-3  
**Classificació:** Comunicació a Congrés Nacional

---

- 5- **Codi:** 122348 **Tipus de participació:** Comunicació (GARCIA LOPERA, ROSA)  
**Any:** 2014 **Títol:** La asignatura de Química I en el Grado en Ingeniería Química: objetivos, metodología y evaluación.  
**Autors:** R. García-Lopera  
**Caràcter:** Nacional  
**Congrés:** II Jornadas de intercambio sobre estrategias de enseñanza de las Ciencias  
**Publicació:**  
**Classificació:** Comunicació a Congrés Nacional

---

- 6- **Codi:** 121669 **Tipus de participació:** Ponència (GIMENEZ ROMERO, DAVID)  
**Any:** 2014 **Títol:** Dual polarization interferometry. A technique to light up the nanomolecular world.  
**Autors:** Jorge Escorihuela, Miguel A. González-Martínez, Jose L. López-Paz, Rosa Puchades, Ángel Maquieira, David Giménez-Romero.  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** VIII International Workshop on Sensors and Molecular Recognition  
**Publicació:** LIBRO DE ARTICULOS (ISBN: 978-84-697-1302-0)  
**Classificació:** Ponència a Congrés Internacional



- 7- **Codi:** 121671 **Tipus de participació:** Poster (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)  
**Any:** 2014 **Títol:** Monomerization strategies for purification of anti-Ro52 polyclonal antibodies  
**Autors:** Noelle M. Nascimento, David Gimenez-Romero, Sergi Morais, Rosa Puchades, Àngel Maquieira  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** VIII International Workshop on Sensors and Molecular Recognition  
**Publicació:** LIBRO DE ARTICULOS (ISBN: 978-84-697-1302-0)  
**Classificació:** Pòster a Congrés Internacional
- 
- 8- **Codi:** 121672 **Tipus de participació:** Poster (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)  
**Any:** 2014 **Títol:** Assessment of spot development on super-hydrophobic surfaces for drug discovery  
**Autors:** Ernest Peris, David Giménez, Sergi Morais, Rosa Puchades, Àngel Maquieira  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** VIII International Workshop on Sensors and Molecular Recognition  
**Publicació:** LIBRO DE ARTICULOS (ISBN: 978-84-697-1302-0)  
**Classificació:** Pòster a Congrés Internacional
- 
- 9- **Codi:** 124607 **Tipus de participació:** Ponència (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)  
**Any:** 2013 **Títol:** Effect of Molecular Packing on Photophysical and Stimulated Emission Properties of a Sterically Hindered DSB Derivative  
**Autors:** S. Varghese, S. K. Park, S. Casado, R. Fischer, R. Resel, B. Milián-Medina, R. Wannemacher, S. Y. Park, J. Gierschner  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** Fourth Symposium on Computing Pi-Conjugated Compounds (CPiC4)  
**Publicació:**  
**Classificació:** Ponència a Congrés Internacional
- 
- 10- **Codi:** 124609 **Tipus de participació:** Ponència invitada (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)  
**Any:** 2013 **Títol:**  
**Autors:** J. Gierschner; S. Varghese; S.-J. Yoon; S. K. Park; M. S. Kwon; E. M. Calzado; S. Casado; P. G. Boj; R. Fischer; B. Milián-Medina; M. A. Díaz-García; R. Resel; R. Wannemacher; S. Y. Park  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** 96th Canadian Chemistry Conference  
**Publicació:**  
**Classificació:** Ponència Invitada àmbit Internacional
- 
- 11- **Codi:** 124612 **Tipus de participació:** Poster (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)  
**Any:** 2013 **Títol:** Computational Design of Low Singlet-Triplet Gap All-Organic Molecules for TADF Systems in OLED Application  
**Autors:** B. Milián-Medina, J. Gierschner  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** Optical Probes of Conjugated Polymers and Organic Nanostructures  
**Publicació:**  
**Classificació:** Pòster a Congrés Internacional
- 
- 12- **Codi:** 124613 **Tipus de participació:** Ponència (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)  
**Any:** 2013 **Títol:** Tuning of Optical & Photophysical Properties in Single Crystals of pi-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. Y. Park  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** Optical Probes of Conjugated Polymers and Organic Nanostructures  
**Publicació:**  
**Classificació:** Ponència a Congrés Internacional

- 
- 13- **Codi:** 124615 **Tipus de participació:** Poster (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)  
**Any:** 2014 **Títol:** Small Substituent, Big Effect: MO Control by Fluorination  
**Autors:** B. Milián-Medina; J. Gierschner  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** IC3EM 2014: 1st International Caparica Conference on Chromogenic and Emissive Materials  
**Publicació:**  
**Classificació:** Pòster a Congrés Internacional
- 
- 14- **Codi:** 124617 **Tipus de participació:** Poster (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)  
**Any:** 2014 **Títol:** Computational Design of Low Singlet-Triplet Gap all-Organic Molecules for TADF Systems in OLED Application  
**Autors:** B. Milián-Medina; J. Gierschner  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** 5th Symposium on Computing pi-Conjugated Compounds  
**Publicació:**  
**Classificació:** Pòster a Congrés Internacional
- 
- 15- **Codi:** 124618 **Tipus de participació:** Comunicació (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)  
**Any:** 2014 **Títol:** Computational Engineering of low Bandgap Copolymers  
**Autors:** M. Wykes; B. Milián-Medina; J. Gierschner  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** 5th Symposium on Computing pi-Conjugated Compounds  
**Publicació:**  
**Classificació:** Comunicació a Congrés Internacional
- 
- 16- **Codi:** 124619 **Tipus de participació:** Poster (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)  
**Any:** 2014 **Títol:** Aggregation-induced enhanced emission  $\lambda$  Intra- and intermolecular structural factors  
**Autors:** J. Shi; Y. Dong; X. Luo; S.-J. Yoon; S. K. Park; S.Y. Park; S. Varghese; B. Milián-Medina; J. Gierschner  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** 5th Symposium on Computing pi-Conjugated Compounds  
**Publicació:**  
**Classificació:** Pòster a Congrés Internacional
- 
- 17- **Codi:** 121670 **Tipus de participació:** Poster (*MONZO MANSANET, ISIDRO; GIMENEZ ROMERO, DAVID*)  
**Any:** 2014 **Títol:** Biointeraction of Recombinant TgMasialoIC4 with Fetuin and Asialofetuin by Piezoelectric Biosensing  
**Autors:** I. Monzo, D. Gimenez-Romero, A. Santos, P. R. Bueno  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** VIII International Workshop on Sensors and Molecular Recognition  
**Publicació:** LIBRO DE ARTICULOS (ISBN: 978-84-697-1302-0)  
**Classificació:** Pòster a Congrés Internacional
- 
- 18- **Codi:** 127005 **Tipus de participació:** Ponència (*PIQUERAS GARCIA, CARMEN*)  
**Any:** 2014 **Títol:** Advances in CB11 chemistry  
**Autors:** F. Sembera, A. Wahab, J. Kaleta, A. Higelin, M. Zamadar, F. Tamadon, C. Douvris, M.C. Piqueras, R. Crespo, J. Klima, J. Ludvik, Z. Janousek, J. Michl  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** Boron Americas (BORAM) XIV Conference  
**Publicació:**  
**Classificació:** Ponència a Congrés Internacional
-

- 
- 19- **Codi:** 127006 **Tipus de participació:** Ponència invitada (*PIQUERAS GARCIA, CARMEN*)  
**Any:** 2014 **Títol:** Excitons and Polarons in Oligosilane Chains: Five Stereoactive Hybrid Orbitals and Valence Shell Expansion on a Silicon Atom  
**Autors:** M.K. MacLeod, M.C. Piqueras, R. Crespo, J. Michl  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** The 17th International Symposium on Silicon Chemistry jointly with the 7th European Silicon Days  
**Publicació:**  
**Classificació:** Ponència Invitada àmbit Internacional
- 
- 20- **Codi:** 127007 **Tipus de participació:** Ponència (*PIQUERAS GARCIA, CARMEN*)  
**Any:** 2014 **Títol:** Fluorinated and trifluoromethylated C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> carborane anions and radicals  
**Autors:** A. Higelin, F. Sembera, F. Tamadon, A. Wahab, Z. Janousek, J. Ludvik, J. Klima, R. Crespo, M.C. Piqueras, J. Michl  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** 248th National Meeting of the American-Chemical-Society (ACS)  
**Publicació:** Abstracts of Papers of the American Chemical Society Volume: 248 Meeting Abstract: 37-FLUO Published: AUG 10 2014 ISSN: 0065-7727  
**Classificació:** Ponència a Congrés Internacional
- 
- 21- **Codi:** 125366 **Tipus de participació:** Ponència (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)  
**Any:** 2014 **Títol:** Electrostatic catalytic effects in light and heavy versions of Purine Nucleoside Phosphorylase  
**Autors:** I. Tuñón  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** Gordon Research Conference. Isotopes in Biological & Chemical Sciences  
**Publicació:**  
**Classificació:** Ponència a Congrés Internacional
- 
- 22- **Codi:** 125367 **Tipus de participació:** Ponència invitada (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)  
**Any:** 2014 **Títol:** Calculation of rate constants of enzymatic reactions using QM/MM MD simulations  
**Autors:** I. Tuñón  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** bioinorganic and theoretical chemistry in relation to energy and environment  
**Publicació:**  
**Classificació:** Ponència Invitada àmbit Internacional
- 
- 23- **Codi:** 125368 **Tipus de participació:** Ponència invitada (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)  
**Any:** 2014 **Títol:** Electrostatic effects and protein motions in enzymatic catalysis  
**Autors:** I. Tuñón  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** cecam workshop: investigating fine quantum effects in biological systems, toward a synergy between experimental and theoretical approaches?  
**Publicació:**  
**Classificació:** Ponència Invitada àmbit Internacional
- 
- 24- **Codi:** 125369 **Tipus de participació:** Ponència invitada (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)  
**Any:** 2014 **Títol:** On the applicability of transition state theory to study enzymatic reactivity  
**Autors:** I. Tuñón  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** III annual workshop of the joint doctorate program on theoretical chemistry and computational modelling  
**Publicació:**  
**Classificació:** Ponència Invitada àmbit Internacional
-

- 
- 25- **Codi:** 122752 **Tipus de participació:** Poster (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ARANDA MORATALLA, JUAN; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)  
**Any:** 2014 **Títol:** Unravelling DNA-cytosine methylation reaction mechanism: QM/MM free energy profiles and Molecular Dynamics study.  
**Autors:** J. Aranda; K. Zinovjev; M. Roca; I. Tuñón  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** Enzyme mechanisms by biological systems, EMBO Conference  
**Publicació:**  
**Classificació:** Pòster a Congrés Internacional
- 
- 26- **Codi:** 122753 **Tipus de participació:** Poster (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ARANDA MORATALLA, JUAN; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)  
**Any:** 2014 **Títol:** Molecular Dynamics and QM/MM Free energy profiles of wild type and mutant of Adenine Methyltransferase M.Taql  
**Autors:** J. Aranda; K. Zinovjev; M. Roca; I. Tuñón  
**Caràcter:** Nacional  
**Congrés:** 9th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2014  
**Publicació:**  
**Classificació:** Pòster a Congrés Nacional
- 
- 27- **Codi:** 119679 **Tipus de participació:** Poster (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; GARCIA MESEGUER, RAFAEL; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)  
**Any:** 2014 **Títol:** Studying the role of protein environment in enzymatic catalysis  
**Autors:** Rafael Garcia-Meseguer; Kiril Zinovjev; J. Javier Ruiz-Perná; Maite Roca; Iñaki Tuñón  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** CECAM Workshop  
**Publicació:**  
**Classificació:** Pòster a Congrés Internacional
- 
- 28- **Codi:** 125221 **Tipus de participació:** Poster (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)  
**Any:** 2014 **Títol:** Interpretation of methyltransferase kinetic isotope effects  
**Autors:** M. Roca; P. Wilson; M. Sato; V. Moliner; I. Tuñón; I. Williams  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** Enzyme Mechanisms by Biological Systems  
**Publicació:**  
**Classificació:** Pòster a Congrés Internacional
- 
- 29- **Codi:** 125222 **Tipus de participació:** Poster (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)  
**Any:** 2014 **Títol:** Are dynamic motions coupled to enzyme catalysis?  
**Autors:** M. Roca; V. Moliner; I. Tuñón  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** 9th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2014  
**Publicació:**  
**Classificació:** Pòster a Congrés Internacional
- 
- 30- **Codi:** 124092 **Tipus de participació:** Poster (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ZINOVJEVS, KIRILS)  
**Any:** 2014 **Títol:** Fast and accurate free energies and mechanisms for complex enzymatic reactions. The Guanidinoacetate Methyltransferase case  
**Autors:** Kirill Zinovjev; Jose Javier Ruiz-Perná; Iñaki Tuñón  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** Enzyme mechanisms by biological systems  
**Publicació:**  
**Classificació:** Pòster a Congrés Internacional
-

- 31- **Codi:** 124093 **Tipus de participació:** Ponència (TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ZINOVJEVS, KIRILS)  
**Any:** 2014 **Títol:** Exploring minimum free energy paths and transition state ensembles for condensed phase reactivity  
**Autors:** Kirill Zinovyjev; Iñaki Tuñón  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** ESPA 2014  
**Publicació:**  
**Classificació:** Ponència a Congrés Internacional
- 
- 32- **Codi:** 113874 **Tipus de participació:** Ponència (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)  
**Any:** 2014 **Títol:** ÉTUDE PAR IMPEDANCES DU RÔLE DE L'AMMONIUM DANS LA STABILISATION DU BLEU DE PRUSSE  
**Autors:** J. Agrisuelas, R. Catalán, A. Cuenca, C. Delgado, C. Gabrielli, J.J. García-Jareño, H. Perrot, F. Vicente.  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** 25eme Forum sur les Impedances Electrochimiques.  
**Publicació:** Libro de Abstracts  
**Classificació:** Ponència a Congrés Internacional
- 
- 33- **Codi:** 113875 **Tipus de participació:** Ponència (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)  
**Any:** 2014 **Títol:** ETUDE PAR  $ac$ -ELECTROGRA VIMETRIE DES PHENOMENES D'INSERTION DES ANIONS ET DU SOLV ANT AU SEIN DE FILMS DE POLY(3,4-ÉTHYLENEDIOXYTHIOPHENE)  
**Autors:** J. Agrisuelas, C. Gabrielli, J.J. García-Jareño, H. Perrot, O. Sel, F. Vicente.  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** 25eme Forum sur les Impedances Electrochimiques.  
**Publicació:** Libro de Abstracts  
**Classificació:** Ponència a Congrés Internacional
- 
- 34- **Codi:** 119035 **Tipus de participació:** Ponència (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)  
**Any:** 2014 **Títol:** AC-ELECTROGRAVIMETRY TO STUDY THE FREE WATER TRANSFER IN THIN POLY(O-TOLUIDINE) FILMS  
**Autors:** Jerónimo Agrisuelas; Claude Gabrielli; José J. García-Jareño; Hubert Perrot; Francisco Vicente  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** XXXV Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química y 1st E3 MEDITERRANEAN MEETING 'ELECTROCHEMISTRY FOR ENVIRONMENT AND ENERGY'  
**Publicació:**  
**Classificació:** Ponència a Congrés Internacional
- 
- 35- **Codi:** 119036 **Tipus de participació:** Ponència invitada (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)  
**Any:** 2014 **Títol:** ELECTROCHEMICAL SYSTEMS CHARACTERIZATION BY MEANS OF IN SITU ELECTROCHEMICAL IMPEDANCE, MASS IMPEDANCE AND COLOR IMPEDANCE SPECTROSCOPY. THE USEFULNESS OF CROSSING IMPEDANCE FUNCTIONS.  
**Autors:** José J. García-Jareño; Jerónimo Agrisuelas; Francisco Vicente  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** XXXV Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química y 1st E3 MEDITERRANEAN MEETING 'ELECTROCHEMISTRY FOR ENVIRONMENT AND ENERGY'  
**Publicació:**  
**Classificació:** Ponència Invitada àmbit Internacional

- 36- **Codi:** 119037 **Tipus de participació:** Ponència (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSÉ JUAN)  
**Any:** 2014 **Títol:** THE POLY-(NEUTRAL RED) AS ELECTROCHEMICAL COATING  
**Autors:** Francisco Vicente; Jerónimo Agrisuelas; David Ferrús; José J. García-Jareño; Manuel Piedras; Ofelia Vila  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** XXXV Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química y 1st E3 MEDITERRANEAN MEETING 'ELECTROCHEMISTRY FOR ENVIRONMENT AND ENERGY'  
**Publicació:**  
**Classificació:** Ponència a Congrés Internacional
- 
- 37- **Codi:** 119038 **Tipus de participació:** Poster (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSÉ JUAN)  
**Any:** 2014 **Títol:** ELECTROCHEMICAL INSERTION OF CESIUM IN PRUSSIAN BLUE  
**Autors:** Raquel Catalán; Jerónimo Agrisuelas; José J. García-Jareño; Antonio F. Roig; Francisco Vicente  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** XXXV Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química y 1st E3 MEDITERRANEAN MEETING 'ELECTROCHEMISTRY FOR ENVIRONMENT AND ENERGY'  
**Publicació:**  
**Classificació:** Pòster a Congrés Internacional
- 
- 38- **Codi:** 119039 **Tipus de participació:** Poster (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSÉ JUAN)  
**Any:** 2014 **Títol:** ELECTROGRAVIMETRY OF COPPER IN ACID MEDIUM  
**Autors:** Alejandro Cuenca; Jerónimo Agrisuelas; José J. García-Jareño; Francisco Vicente  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** XXXV Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química y 1st E3 MEDITERRANEAN MEETING 'ELECTROCHEMISTRY FOR ENVIRONMENT AND ENERGY'  
**Publicació:**  
**Classificació:** Pòster a Congrés Internacional
- 
- 39- **Codi:** 119040 **Tipus de participació:** Poster (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSÉ JUAN)  
**Any:** 2014 **Títol:** ELECTROCHEMICAL CHARACTERIZATION OF THERMOPLASTIC+GRAPHITE+ZINC COMPOSITE MATERIALS  
**Autors:** Manuel Piedras; Jerónimo Agrisuelas; José J. García-Jareño; Javier Navarro-Laboulais; Concepción Sanz; Francisco Vicente  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** XXXV Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química y 1st E3 MEDITERRANEAN MEETING 'ELECTROCHEMISTRY FOR ENVIRONMENT AND ENERGY'  
**Publicació:**  
**Classificació:** Pòster a Congrés Internacional
- 
- 40- **Codi:** 119700 **Tipus de participació:** Ponència (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSÉ JUAN)  
**Any:** 2014 **Títol:** Interfacial role of Cesium in Prussian Blue Films  
**Autors:** J. Agrisuelas; R. Catalán; C. Delgado; J.J. García-Jareño; A.F. Roig; F. Vicente  
**Caràcter:** Internacional  
**Congrés:** Smart Materials and Surfaces  
**Publicació:**  
**Classificació:** Ponència a Congrés Internacional