

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

- 1- **Codi:** 014874 **Clau:** Tesi Doctoral (*VILA BUSO, MARIA AMPARO OFEL*)
Any: 2010 **Títol:** Desarrollo de nanomedicinas liposomales basadas en vesiculas lipídicas recubiertas por biopolímeros.
Autor: Madrigal Carballo, Sergio **Director:** Vila Busó, M.A.Ofelia, Molina Lucas, Francisco **Qualificació:** Excel-lent cum laude
Classificació: Tesis doctoral Excelent Cum Laude
-



Articles en Revistes

-
- 1- **Codi:** 053557 **Clau:** Article (*ARANDA MORATALLA, JUAN; LOPEZ CANUT, VIOLETA; ROCA MOLINER, MARIA TERESA; TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2010 **Autors:** J. Aranda; M. Roca; V. Lopez-Canut; I. Tuñón
Títol: Theoretical Study of the Catalytic mechanism of DNA-(N4-Cytosine)-Methyltransferase from the bacterium *Proteus vulgaris*
Revista: 909613 - Journal of Physical Chemistry B
Informació addicional: **Volum:** 114 **Número:** **Pàgina inicial:** 8467 **Pàgina final:** 8473 **País:** USA - ESTATS UNITS D'AMÈRICA
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 2- **Codi:** 065862 **Clau:** Article (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO*)
Any: 2010 **Autors:** Lopez-Gines C, Gil-Benso R, Ferrer-Luna R, Benito R, Serna E, Gonzalez-Darder J, Quilis V, Monleon D, Celda B, Cerdá-Nicolas M.
Títol: New pattern of EGFR amplification in glioblastoma and the relationship of gene copy number with gene expression profile.
Revista: 903023 - Modern Pathology
Informació addicional: **Volum:** 23(6) **Número:** **Pàgina inicial:** 856 **Pàgina final:** 865 **País:** USA - ESTATS UNITS D'AMÈRICA
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 3- **Codi:** 065864 **Clau:** Article (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO*)
Any: 2010 **Autors:** Ferrer-Luna R, Núñez L, Piquer J, Arias E, Dasí F, Cervio A, Arakaki N, Sevlever G, Celda B, Martinetto H.
Títol: Whole-genomic survey of oligodendroglial tumors: correlation between allelic imbalances and gene expression profiles.
Revista: 303603 - Journal of Neurooncology
Informació addicional: **Volum:** 103(1) **Número:** **Pàgina inicial:** 71 **Pàgina final:** 85 **País:** DEU - ALEMANYA
Classificació: Article Àmbit Internacional
-
- 4- **Codi:** 065865 **Clau:** Article (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO*)
Any: 2010 **Autors:** Cuellar-Baena S, Morales JM, Martinetto H, Calvar J, Sevlever G, Castellano G, Cerdá-Nicolás M, Celda B, Monleon D.
Títol: Comparative metabolic profiling of paediatric ependymoma, medulloblastoma and pilocytic astrocytoma.
Revista: 909960 - International Journal of Molecular Medicine
Informació addicional: **Volum:** 26(6) **Número:** **Pàgina inicial:** 941 **Pàgina final:** 948 **País:** ENG - ANGLATERRA
Classificació: Article ISI al 3er quartil
-
- 5- **Codi:** 065863 **Clau:** Article (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO; ESTEVE MOYA, VICENT*)
Any: 2010 **Autors:** Piñero-Sagredo E, Nunes S, de Los Santos MJ, Celda B, Esteve V.
Títol: NMR metabolic profile of human follicular fluid.
Revista: 908381 - NMR in Biomedicine
Informació addicional: **Volum:** 23(5) **Número:** **Pàgina inicial:** 485 **Pàgina final:** 489 **País:** ENG - ANGLATERRA
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 6- **Codi:** 065866 **Clau:** Article (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO; MARTINEZ BISBAL, MARIA CARMEN*)
Any: 2010 **Autors:** Croitor Sava A, Sima DM, Martinez-Bisbal MC, Celda B, Van Huffel S
Títol: Non-negative blind source separation techniques for tumor tissue typing using HR-MAS signals.
Revista: 310126 - Conf Proc IEEE Eng Med Biol Soc
Informació addicional: **Volum:** 2010 **Número:** **Pàgina inicial:** 3658 **Pàgina final:** 3661 **País:** USA - ESTATS UNITS D'AMÈRICA
Classificació: Altres
-

- 7- **Codi:** 061812 **Clau:** Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2010 **Autors:** R. García-Domenech, J. Aguilera, A. El Moncef, S. Pocovi and Jorge Gálvez
Títol: Application of molecular topology to the prediction of mosquito repellents of a group of terpenoid compounds
Revista: 909338 - Molecular Diversity
Informació adicional: **Volum:** 14 **Número:** **Pàgina inicial:** 321 **Pàgina final:** 329 **País:** NLD - PAÏSOS BAIXOS
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 8- **Codi:** 061813 **Clau:** Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2010 **Autors:** Ramón García-Domenech; Mayra C. Montealegre; Edwige G. Nagham; Nancy Sandoval; Manuel Santana; Jorge Galvez
Títol: Aplicación de la Topología Molecular para la predicción de la actividad anti-VIH-1 de un grupo de compuestos análogos del aciclovir y ganciclovir
Revista: 913565 - Anales de la Real Academia Nacional de Farmacia
Informació adicional: **Volum:** 76 **Número:** **Pàgina inicial:** 45 **Pàgina final:** 57 **País:** ESP - ESPANYA
Classificació: Article ISI al 4rt quartil
-
- 9- **Codi:** 061814 **Clau:** Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2010 **Autors:** J. Galvez; M. Gálvez-Llompart and R. García-Domenech
Títol: Application of molecular topology for the prediction of the reaction times and yields under solvent-free conditions
Revista: 910375 - Green Chemistry
Informació adicional: **Volum:** 12 **Número:** **Pàgina inicial:** 1056 **Pàgina final:** 1061 **País:** ENG - ANGLATERRA
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 10- **Codi:** 061816 **Clau:** Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2010 **Autors:** J. Galvez and R. García-Domenech
Títol: On the contribution of molecular topology to drug design and discovery
Revista: 914583 - Current Computer-Aided Drug Design
Informació adicional: **Volum:** 6 **Número:** 4 **Pàgina inicial:** 252 **Pàgina final:** 268 **País:** ARE - UNIÓ DELS EMIRATS ÀRABS
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 11- **Codi:** 061815 **Clau:** Article (*GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2010 **Autors:** M. Gálvez-Llompart; R.M. Giner; M.C. Recio; S. Candeletti and R. García-Domenech
Títol: Application of molecular topology to the search of novel NSAIDs. Experimental validation of activity.
Revista: 913841 - Letters In Drug Design & Discovery
Informació adicional: **Volum:** 7 **Número:** 6 **Pàgina inicial:** 438 **Pàgina final:** 445 **País:** USA - ESTATS UNITS D'AMÈRICA
Classificació: Article ISI al 4rt quartil
-
- 12- **Codi:** 061817 **Clau:** Article (*GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2010 **Autors:** Y. Marrero-Ponce; E. R. Martínez-Albelo; G. M. Casañola-Martín; J.A. Castillo-Garit; Y. Echevería-Díaz; V. Romero Zaldivar; J. Tygat; J.E. Rodríguez Borges; R. García-Domenech; F. Torrens; F. Pérez-Giménez
Títol: Bond-based linear indices of the non-stochastic and stochastic edge-adjacency matrix. 1. Theory and modeling of ChemPhys properties of organic molecules
Revista: 909338 - Molecular Diversity
Informació adicional: **Volum:** 14 **Número:** **Pàgina inicial:** 731 **Pàgina final:** 753 **País:** NLD - PAÏSOS BAIXOS
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 13- **Codi:** 064563 **Clau:** Article (*GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2010 **Autors:** Ramón García-Domenech; Pablo García-Mujica; Úrsula Gil; Cristina Casanova; Joycelyna Mireilli Beltrán; Jorge Gálvez.
Títol: Search of QSAR models for natural sesquiterpenes repellent activity against the Yellow Fever mosquito, Aedes aegypti
Revista: 904383 - Afinidad
Informació adicional: **Volum:** LXVII **Número:** 547 **Pàgina inicial:** 187 **Pàgina final:** 192 **País:** ESP - ESPANYA
Classificació: Article ISI al 4rt quartil

- 14- **Codi:** 055063 **Clau:** Article (GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN; GIMENEZ ROMERO, DAVID; VICENTE PEDROS, FRANCISCO)
Any: 2010 **Autors:** J. Agrisuelas, J.J. García-Jareño, D. Gimenez-Romero and F. Vicente
Títol: An approach to the electrochemical activity of poly-(phenothiazines) by complementary electrochemical impedance spectroscopy and Vis-NIR spectroscopy
Revista: 901127 - Electrochimica Acta
Informació adicional: **Volum:** 55 **Número:** 21 **Pàgina inicial:** 6128 **Pàgina final:** 6135 **País:** ENG - ANGLATERRA
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 15- **Codi:** 055062 **Clau:** Article (GIMENEZ ROMERO, DAVID)
Any: 2010 **Autors:** Paulo Roberto Bueno, David Giménez-Romero, Fabio Furlan Ferreira and Grazielle Oliveira Setti
Títol: Electrochemical capacitance spectroscopy and capacitive relaxation of the changeover process in iron hexacyanoferrate molecular compound
Revista: 901127 - Electrochimica Acta
Informació adicional: **Volum:** 55 **Número:** 21 **Pàgina inicial:** 6147 **Pàgina final:** 6155 **País:** ENG - ANGLATERRA
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 16- **Codi:** 053556 **Clau:** Article (LOPEZ CANUT, VIOLETA; ROCA MOLINER, MARIA TERESA; TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO)
Any: 2010 **Autors:** V. López-Canut, M. Roca, J. Bertrán, V. Moliner, I. Tuñón
Títol: Theoretical Study of Phosphodiester Hydrolysis in Nucleotide Pyrophosphatase/Phosphodiesterase. Environmental Effects on the Reaction Mechanism
Revista: 900665 - Journal of the American Chemical Society
Informació adicional: **Volum:** 132 **Número:** **Pàgina inicial:** 6955 **Pàgina final:** 6963 **País:** USA - ESTATS UNITS D'AMÉRICA
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 17- **Codi:** 064002 **Clau:** Article (PEREZ GIMENEZ, FACUNDO)
Any: 2010 **Autors:** J. A. Castillo-Garit, M. C. Vega, M. Rolon, Y. Marrero-Ponce, V. V. Kouznetsov, D. F. Amado Torres, A. Gómez-Barrio, A. Alvarez Bello, A. Montero, F. Torrens and F. Pérez-Giménez
Títol: Computational discovery of novel trypanosomicidal drug-like chemicals by using bond-based non-stochastic and stochastic quadratic maps and linear discriminant analysis
Revista: 908777 - European Journal of Pharmaceutical Sciences
Informació adicional: Eur. J. Pharm. Sci. **Volum:** 39 **Número:** **Pàgina inicial:** 30 **Pàgina final:** 36 **País:** NLD - PAÏSOS BAIXOS
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 18- **Codi:** 064006 **Clau:** Article (PEREZ GIMENEZ, FACUNDO)
Any: 2010 **Autors:** Y. Marrero-Ponce, E. R. Martínez-Albelo, G. M. Casañola-Martín, J. A. Castillo-Garit, Y. Echevería-Díaz, V. Romero Zaldivar, J. Tygat, J. E. Rodríguez Borges, R. García-Domenech, F. Torrens and F. Pérez-Giménez
Títol: Bond-based linear indices of the non-stochastic and stochastic edge-adjacency matrix. 1. Theory and modeling of ChemPhys properties of organic molecules
Revista: 909338 - Molecular Diversity
Informació adicional: Mol. Divers. **Volum:** 14 **Número:** **Pàgina inicial:** 731 **Pàgina final:** 753 **País:** NLD - PAÏSOS BAIXOS
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 19- **Codi:** 064009 **Clau:** Article (PEREZ GIMENEZ, FACUNDO)
Any: 2010 **Autors:** G. M. Casañola-Martín, Y. Marrero-Ponce, M. T. H. Khan, S. B. Khan, F. Torrens, F. Pérez-Jiménez, A. Rescigno and C. Abad
Títol: Bond-based 2D quadratic fingerprints in QSAR studies. Virtual and *in vitro* tyrosinase inhibitory activity elucidation
Revista: 913351 - Chemical Biology & Drug Design
Informació adicional: Chem. Biol. Drug Des. **Volum:** 76 **Número:** **Pàgina inicial:** 538 **Pàgina final:** 545 **País:** USA - ESTATS UNITS D'AMÉRICA
Classificació: Article ISI al 3er quartil

- 20- **Codi:** 064010 **Clau:** Article (*PEREZ GIMENEZ, FACUNDO*)
Any: 2010 **Autors:** S. E. Ortega-Broche, Y. Marrero-Ponce, Y. E. Díaz, F. Torrens and F. Pérez-Giménez
Títol: TOMOCOMD-CAMPS and protein bilinear indices Novel bio‑macromolecular descriptors for protein research: I. Predicting protein stability effects of a complete set of alanine substitutions in the Arc repressor
Revista: 913147 - Febs Journal
Informació adicional: FEBS J. **Volum:** 277 **Número:** **Pàgina inicial:** 3118 **Pàgina final:** 3146 **País:** GBR - REGNE UNIT
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 21- **Codi:** 066238 **Clau:** Article (*PEREZ GIMENEZ, FACUNDO*)
Any: 2010 **Autors:** Gerardo M. Casañola-Martín, Yovani Marrero-Ponce, Mahmud T. H. Khan, Sher B. Khan, Francisco Torrens, Facundo Perez-Jimenez, Antonio Rescigno and Concepcion Abad
Títol: Bond-Based 2D Quadratic Fingerprints in QSAR Studies: Virtual and In vitro Tyrosinase Inhibitory Activity Elucidation
Revista: 913351 - Chemical Biology & Drug Design
Informació adicional: **Volum:** 76 **Número:** **Pàgina inicial:** 538 **Pàgina final:** 545 **País:** GBR - REGNE UNIT
Classificació: Article ISI al 3er quartil
-
- 22- **Codi:** 053555 **Clau:** Article (*ROCA MOLINER, MARIA TERESA*)
Any: 2010 **Autors:** Benjamin M. Messer, Maite Roca, Zhen T. Chu, Spyridon Vicatos, Alexandra Vardi Kilshtain, Arieh Warshel
Títol: Multiscale simulations of protein landscapes: Using coarse grained models as reference potentials to full explicit models
Revista: 900355 - Proteins-Structure Function And Bioinformatics
Informació adicional: **Volum:** 78 **Número:** **Pàgina inicial:** 1212 **Pàgina final:** 1227 **País:** USA - ESTATS UNITS D'AMÉRICA
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 23- **Codi:** 057009 **Clau:** Article (*ROCA MOLINER, MARIA TERESA; TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2010 **Autors:** N. Kanaan, M. Roca, S. Martí, V. Moliner, I. Tuñón
Títol: Theoretical Study of the Temperature Dependence of Dynamic Effects in Thymidylate Synthase
Revista: 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics
Informació adicional: **Volum:** 12 **Número:** **Pàgina inicial:** 11657 **Pàgina final:** 11664 **País:** GBR - REGNE UNIT
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 24- **Codi:** 057010 **Clau:** Article (*ROCA MOLINER, MARIA TERESA; TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2010 **Autors:** M. Roca, M. Oliva, R. Castillo, V. Moliner, I. Tuñón
Títol: Do Dynamic Effects Play a Significant Role in Enzyme Catalysis? A Theoretical Analysis of the Formate Dehydrogenase
Revista: 908895 - Chemistry-A European Journal
Informació adicional: **Volum:** 16 **Número:** **Pàgina inicial:** 11399 **Pàgina final:** 11411 **País:** DEU - ALEMANYA
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 25- **Codi:** 062106 **Clau:** Article (*ROCA MOLINER, MARIA TERESA; TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2010 **Autors:** N. Kanaan; M. Roca; I. Tuñón; S. Martí; V. Moliner
Títol: Application of Grote-Hynes Theory to the Reaction Catalyzed by Thymidylate Synthase
Revista: 909613 - Journal of Physical Chemistry B
Informació adicional: **Volum:** 114 **Número:** **Pàgina inicial:** 13593 **Pàgina final:** 13600 **País:** USA - ESTATS UNITS D'AMÉRICA
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 26- **Codi:** 064269 **Clau:** Article (*TEJERO TOQUERO, ROBERTO*)
Any: 2010 **Autors:** Jorge González; José M. Llinares; Raquel Belda; Javier Pitarch; Concepción Soriano; Roberto Tejero; Begoña Verdejo; Enrique García-España
Títol: Tritopic phenanthroline and pyridine tail-tied aza-scorpianids
Revista: 912818 - Organic & Biomolecular Chemistry
Informació adicional: **Volum:** 8 **Número:** **Pàgina inicial:** 2367 **Pàgina final:** 2376 **País:** ENG - ANGLATERRA
Classificació: Article ISI al 1er quartil

- 27- **Codi:** 065255 **Clau:** Article (*TOMAS VERT, FRANCISCO*)
Any: 2010 **Autors:** Vega-Hissi, E. G. ; Andrada, M. F. ; Zamarbide, G. ; Estrada, M. R. ; Tomás-Vert, F
Títol: Theoretical studies on sulfanilamide and derivatives with antibacterial activity: conformational and electronic analysis
Revista: 909303 - Journal of Molecular Modeling
Informació adicional: **Volum:** DOI 10.1007 **Número:** **Pàgina inicial:** **Pàgina final:** **País:** DEU - ALEMANYA
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 28- **Codi:** 057944 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2010 **Autors:** J. Javier Ruiz Pernía, Iñaki Tuñón, Ian H. Williams
Títol: Computational Simulation of the Lifetime of the Methoxymethyl Cation in Water. A Simple Model for a Glycosyl Cation; When Is an Intermediate an Intermediate?
Revista: 909613 - Journal of Physical Chemistry B
Informació adicional: **Volum:** 114 **Número:** **Pàgina inicial:** 5769 **Pàgina final:** 5774 **País:** USA - ESTATS UNITS D'AMÈRICA
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 29- **Codi:** 057946 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2010 **Autors:** Jeronimo Lameira, Claudio Nahum Alves, Vicent Moliner, Sergio Martí, Raquel Castillo, Iñaki Tuñón
Títol: Quantum Mechanical/Molecular Mechanical Molecular Dynamics Simulation of Wild-Type and Seven Mutants of CpNagJ in Complex with PUGNAc
Revista: 909613 - Journal of Physical Chemistry B
Informació adicional: **Volum:** 114 **Número:** **Pàgina inicial:** 7029 **Pàgina final:** 7036 **País:** USA - ESTATS UNITS D'AMÈRICA
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 30- **Codi:** 063864 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2010 **Autors:** Pedro Pérez-Bermúdez, Aurelio A. Moya García, Iñaki Tuñón, Isabel Gavidia
Títol: Digitalis purpurea P5BR2, encoding steroid 5b-reductase, is a novel defense-related gene involved in cardenolide biosynthesis
Revista: 900525 - New Phytologist
Informació adicional: **Volum:** 185 **Número:** **Pàgina inicial:** 687 **Pàgina final:** 700 **País:** ENG - ANGLATERRA
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 31- **Codi:** 064075 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2010 **Autors:** S. Martí, J. Andrés, V. Moliner, E. Silla, I. Tuñón, J. Bertrán
Títol: Theoretical QM/MM Studies of Enzymatic Pericyclic Reactions
Revista: 310981 - Interdisciplinary Sciences: Computational Life Sciences
Informació adicional: **Volum:** 2 **Número:** **Pàgina inicial:** 115 **Pàgina final:** 131 **País:** CAN - CANADÀ
Classificació: Altres
-
- 32- **Codi:** 065712 **Clau:** Article (*VILA BUSO, MARIA AMPARO OFEL*)
Any: 2010 **Autors:** Madrigal, S.; S. Lim, G-Rodriguez, A.O.Vila, C.G.Krueger, S.Gunasekaran, J.D.Reed.
Títol: Biopolymer coating of soybean lecithin liposomes via layer-by-layer self-assembly as novel delivery system for ellagic acid
Revista: 311109 - journal of functional foods
Informació adicional: **Volum:** 2 **Número:** **Pàgina inicial:** 99 **Pàgina final:** 106 **País:** USA - ESTATS UNITS D'AMÈRICA
Classificació: Altres
-
- 33- **Codi:** 065713 **Clau:** Article (*VILA BUSO, MARIA AMPARO OFEL*)
Any: 2010 **Autors:** S.Madrigal, A.O.Vila, M.Sibaja, J.D.Reed, F.Molina
Títol: In vitro uptake of lysozyme-loaded liposomes coated with chitosan biopolymer as model immunoadjuvants
Revista: 909596 - Journal of Liposome Research
Informació adicional: **Volum:** 20 **Número:** 1 **Pàgina inicial:** 1 **Pàgina final:** 8 **País:** USA - ESTATS UNITS D'AMÈRICA
Classificació: Article ISI al 3er quartil

- 34- **Codi:** 065714 **Clau:** Article (*VILA BUSO, MARIA AMPARO OFEL*)
Any: 2010 **Autors:** S.Madrigal-Carballo, G.Porras, M.Sibaja, J.Vega-Baudrit, A.O.Vila, F.Molina.
Títol: Vesículas liposomales estabilizadas con quitosano. Estudio electrocinético
Revista: 000946 - Revista Iberoamericana de Polímeros.
Informació adicional: **Volum:** 11 **Número:** 1 **Pàgina inicial:** 43 **Pàgina final:** 57 **País:** ESP - ESPANYA
Classificació: Altres
-
- 35- **Codi:** 065715 **Clau:** Article (*VILA BUSO, MARIA AMPARO OFEL*)
Any: 2010 **Autors:** S.Mura, M.Manconi, D.Valenti, C.Sinico, A.O.Vila, A.M.Fadda
Títol: Transcutol containing vesicles for topical delivery of minoxidil
Revista: 909289 - Journal of Drug Targeting
Informació adicional: **Volum:** **Número:** on-line **Pàgina inicial:** 1 **Pàgina final:** 8 **País:** ENG - ANGLATERRA
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-



Capítols de Llibres i altres publicacions

-
- 1- **Codi:** 037724 **Clau:** Capítol de llibre (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2010 **Títol:** Molecular topology in QSAR and drug design studies (Chapter 3)
Autors: J. Gálvez and R. García-Domenech
Llibre: QSPR-QSAR Studies on Desired Properties for Drug Design
ISBN: 978-81-308-0404-0
Classificació: Capítol en llibre internacional
-
- 2- **Codi:** 039453 **Clau:** Capítol de llibre (*PEREZ GIMENEZ, FACUNDO*)
Any: 2010 **Títol:** Computational discovery of novel trypanosomicidal drug-like chemicals by using bond-based non-stochastic and stochastic quadratic maps and linear discriminant analysis
Autors: J. A. Castillo-Garit, M. C. Vega, M. Rolon, Y. Marrero-Ponce, V. V. Kouznetsov, D. F. Amado Torres, A. Gómez-Barrio, A. Alvarez Bello, A. Montero, F. Torrens and F. Pérez-Giménez
Llibre: Synthetic Organic Chemistry
ISBN:
Classificació: Capítol en llibre internacional
-
- 3- **Codi:** 039513 **Clau:** Capítol de llibre (*TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2010 **Títol:** Computational Modelling of Biological Systems. The LDH Story
Autors: S. Ferrer, S. Martí, V. Moliner, I. Tuñón
Llibre: Kinetics and Dynamics: From Nano to Bio-Scale Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics
ISBN: 978-90-481-3033-7
Classificació: Capítol en llibre internacional
-

Participació en Congressos i Reunions Científiques

- 1- **Codi:** 070920 **Tipus de participació:** Poster (ARANDA MORATALLA, JUAN; ROCA MOLINER, MARIA TERESA; TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO)
Any: 2010 **Títol:** Theoretical Study of the Reaction Mechanism of Cytosine C5-Methyltransferase M.Hhai
Autors: J. Aranda; M.Roca; I. Tuñón **Caràcter:** Internacional
Congrés: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications.
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings

- 2- **Codi:** 074317 **Tipus de participació:** Comunicació (CELDA MUÑOZ, BERNARDO)
Any: 2010 **Títol:** Evaluación clínica del Sistema Informático de Apoyo al Diagnóstico (CADS) de eTUMOUR para la clasificación de tumores cerebrales
Autors: Bernardo Celda Muñoz, Daniel Monleón Salvadó, Juan Manuel Gil Cano, Enrique Mollá Olmos, José Cervera Deval, Luis Martí Bonmatí **Caràcter:** Nacional
Congrés: SERAM 2010
Publicació:
Classificació: Comunicació Nacional sense Proceedings

- 3- **Codi:** 075789 **Tipus de participació:** Comunicació (CELDA MUÑOZ, BERNARDO)
Any: 2010 **Títol:** Identifying Constituent Tumor Tissue Subclasses in HR-MAS Spectra Using Advanced Blind Source Separation Techniques
Autors: Anca R. Sava Croitor, D.M. Sima, B. Celda, S. Van Huffel **Caràcter:** Internacional
Congrés: ISMRM-ESMRMB Joint Annual Meeting 2010
Publicació:
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional sense Proceedings

- 4- **Codi:** 074314 **Tipus de participació:** Comunicació (CELDA MUÑOZ, BERNARDO; MARTINEZ BISBAL, MARIA CARMEN)
Any: 2010 **Títol:** Ex vivo metabolic profiles for the differential classification between Oligodendrogial and GBM tumours
Autors: Rubén Ferrer-Luna¹, Jorge Calvar², Jose Manuel Morales³, Horacio Martinetto², MC. Martinez-Bisbal⁴, M. Cerdá-Nicolás⁵, Gustavo Sevlever², Daniel Monleón⁶ and Bernardo Celda^{1,4} **Caràcter:** Internacional
Congrés: ISMRM-ESMRMB Joint Annual Meeting 2010
Publicació:
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional sense Proceedings

- 5- **Codi:** 074315 **Tipus de participació:** Ponència (CELDA MUÑOZ, BERNARDO; MARTINEZ BISBAL, MARIA CARMEN)
Any: 2010 **Títol:** Diferenciación metabólica entre gliomas de grado II, III y IV y entre GBM y metástasis mediante el análisis combinado de las técnicas de espectroscopia de imagen de RMI y SV
Autors: Bernardo Celda, MCarmen Martínez-Bisbal, Enrique Mollá, José Piquer, Luis G. González-Bonet, P. Riesgo⁴, Jose L. Llácer **Caràcter:** Nacional
Congrés: SENEK 2010
Publicació:
Classificació: Ponència en Congrés Nacional sense Proceedings

- 6- **Codi:** 074316 **Tipus de participació:** Comunicació (CELDA MUÑOZ, BERNARDO; MARTINEZ BISBAL, MARIA CARMEN)
Any: 2010 **Títol:** Diferenciación entre metástasis cerebrales y GBM basado en RMI, 1H ERM y ERMI
Autors: Bernardo Celda Muñoz, MCarmen Martínez Bisbal, Jose Piquer Belloch, Enrique Molla Olmos **Caràcter:** Nacional
Congrés: SERAM 2010
Publicació:
Classificació: Comunicació Nacional sense Proceedings

-
- 7- **Codi:** 075788 **Tipus de participació:** Comunicació (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO; MARTINEZ BISBAL, MARIA CARMEN*)
Any: 2010 **Títol:** Non-Negative Matrix Factorization for Differentiation of Brain Metastasis and Glioblastoma Multiforme, and Visualization of Tumor Infiltration
Autors: Jan Luts, T. Laudadio, M.C. Martinez-Bisbal, S. Van Cauter, E. Molla, J. Piquer, J. Suykens, U. Himmelreich, B. Celda, S. Van Huffel **Caràcter:** Internacional
Congrés: ISMRM-ESMRMB Joint Annual Meeting 2010
Publicació:
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 8- **Codi:** 074313 **Tipus de participació:** Comunicació (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO; MARTINEZ BISBAL, MARIA CARMEN; MARTINEZ GRANADOS, M. BEATRIZ*)
Any: 2010 **Títol:** Clinical evaluation of a fully automated Computer Aid Decision System (CADS) for brain tumour supported diagnosis. eTUMOUR project FP6-2002-LSH-503094
Autors: D. Monleon1, MC. Martínez-Bisbal2,3, P. Pla2, J. Gil-Cano2, B. Martínez-Granados2, E. Molla4, A. Revert5, L. Martí-Bonmatí6, J. Leon7 .B. Celda2,3, eTUMOUR partners **Caràcter:** Internacional
Congrés: ISMRM-ESMRMB Joint Annual Meeting 2010
Publicació:
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 9- **Codi:** 069859 **Tipus de participació:** Poster (*CRESPO CRESPO, RAUL*)
Any: 2010 **Títol:** deeply doped polyacetylenes with attached carborane counterions
Autors: J. Michl, R. Crespo, M.C. Piqueras **Caràcter:** Internacional
Congrés: 50th Sanibel Symposium
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 10- **Codi:** 069860 **Tipus de participació:** Ponència invitada (*CRESPO CRESPO, RAUL*)
Any: 2010 **Títol:** theoretical advances on the design of deeply doped polyacetylenes with attached carborane counterions
Autors: R. Crespo, M.C. Piqueras **Caràcter:** Internacional
Congrés: Department of Chemistry and Biochemistry Seminars. University of Colorado at Boulder
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada
-
- 11- **Codi:** 072408 **Tipus de participació:** Poster (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE*)
Any: 2010 **Títol:** Application of Molecular Topology to the Search of New Compounds Active in Ulcerative Colitis and Crohn's Disease
Autors: Jorge Galvez; Maria Galvez-Llompart; Ramon Garcia-Domenech **Caràcter:** Internacional
Congrés: 11th Annual Drug Discovery
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 12- **Codi:** 069128 **Tipus de participació:** Ponència (*GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2010 **Títol:** Application of Molecular Topology to the Search of New Compounds Active in Ulcerative Colitis and Crohn's Disease.
Autors: Jorge Gálvez Alvarez, María Gálvez Llompart y Ramón García Domenech **Caràcter:** Internacional
Congrés: 11th Annual Drug Discovery
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacionals sense Proceedings
-

-
- 13- **Codi:** 060544 **Tipus de participació:** Comunicació (*GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN; GIMENEZ ROMERO, DAVID; VICENTE PEDROS, FRANCISCO*)
Any: 2010 **Títol:** Spectroscopie d'Impedance, Acelectrogravimetrie et Impedance de Couleur pour l'Etude des Processus Redox du Bleu de Prusse /Sel d'Everitt
Autors: J. Agrisuelas, C. Gabrielli, J.J. Garcia-Jareno, D. Gimenez-Romero, H. Perrot et F. Vicente **Caràcter:** Internacional
Congrés: 22ème Forum sur les Impédances Electrochimiques
Publicació: Libro de Resúmenes del congreso
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional amb Proceedings
-
- 14- **Codi:** 062654 **Tipus de participació:** Comunicació (*GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN; GIMENEZ ROMERO, DAVID; VICENTE PEDROS, FRANCISCO*)
Any: 2010 **Títol:** Simultaneous Electrochemical, Mass and Color Impedances of Polymer Films
Autors: Jeronimo Agrisuelas; Jose J. García-Jareño; David Gimenez-Romero; Francisco Vicente **Caràcter:** Internacional
Congrés: 8th International Symposium on Electrochemical Impedance Spectroscopy
Publicació: libro de abstracts
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional amb Proceedings
-
- 15- **Codi:** 068412 **Tipus de participació:** Ponència (*GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN; GIMENEZ ROMERO, DAVID; VICENTE PEDROS, FRANCISCO*)
Any: 2010 **Títol:** Intermediate monovalent state M(I) stabilized into the interfacial region metal m/solution
Autors: J.J. Garcia-Jareño, D. Gimenez-Romero, F. Vicente **Caràcter:** Internacional
Congrés: The Eight International Symposium on Electrochemical Micro & Nanosystem Technologies
Publicació: Libro de Resúmenes del congreso
Classificació: Ponència a Congrés Internacional amb Proceedings
-
- 16- **Codi:** 068413 **Tipus de participació:** Comunicació (*GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN; GIMENEZ ROMERO, DAVID; VICENTE PEDROS, FRANCISCO*)
Any: 2010 **Títol:** Observación mediante microscopio de efecto túnel de la corrosión forzada del níquel
Autors: J. Agrisuelas, J.J. Garcia-Jareno, D. Gimenez-Romero, J. Hernández, F. Negrete, F. Vicente **Caràcter:** Internacional
Congrés: XIX Congreso de la SIBAE
Publicació: Libro de Resúmenes del congreso
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional amb Proceedings
-
- 17- **Codi:** 068414 **Tipus de participació:** Poster (*GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN; GIMENEZ ROMERO, DAVID; VICENTE PEDROS, FRANCISCO*)
Any: 2010 **Títol:** Un ejemplo de la aportación de la electroquímica a la bioética entorno a los neurotóxicos: Comparación electroquímica del Malatión y del Metil-paratión
Autors: J. Agrisuelas, M. Grattieri, J.J. Garcia-Jareno, D. Gimenez-Romero, J. Hernández, S. Toti, F. Vicente **Caràcter:** Internacional
Congrés: XIX Congreso de la SIBAE
Publicació: Libro de Resúmenes del congreso
Classificació: Pòster a Congrés Internacional amb Proceedings
-
- 18- **Codi:** 062653 **Tipus de participació:** Comunicació (*GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN; VICENTE PEDROS, FRANCISCO*)
Any: 2010 **Títol:** Investigation of Ionic Transport in Nafion by Ac-Electrogravimetry
Autors: C. Gabrielli; H. Perrot; L. To Thi Kim; J. Garcia-Jareño; F. Vicente **Caràcter:** Internacional
Congrés: 8th International Symposium on Electrochemical Impedance Spectroscopy
Publicació: libro de abstracts
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional amb Proceedings
-
- 19- **Codi:** 074007 **Tipus de participació:** Poster (*GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN; VICENTE PEDROS, FRANCISCO*)
Any: 2010 **Títol:** Ohmic drop and capacitive effects in composite and modified electrodes
Autors: José Juan García-Jareño; Javier Navarro-Laboulais, Francisco Vicente **Caràcter:** Internacional
Congrés: ESEAC 2010
Publicació: actas del congreso
Classificació: Pòster a Congrés Internacional amb Proceedings
-

-
- 20- **Codi:** 068750 **Tipus de participació:** Poster (*LOPEZ CANUT, VIOLETA; ROCA MOLINER, MARIA TERESA; TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2010 **Títol:** theoretical study of phosphodiester hydrolysis in nucleotide pyrophosphatase/phosphodiesterase. environmental effects on the reaction mechanism.
Autors: V. López-Canut; M.Roca; V. Moliner; I. Tuñón **Caràcter:** Internacional
Congrés: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications.
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 21- **Codi:** 069329 **Tipus de participació:** Poster (*LOPEZ CANUT, VIOLETA; ROCA MOLINER, MARIA TERESA; TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2010 **Títol:** Theoretical Study of the Catalytic Promiscuity in the Alkaline Phosphatase Superfamily
Autors: Maite Roca, Violeta Lopez-Canut, Juan Bertrán, Vicent Moliner, Iñaki Tuñón **Caràcter:** Internacional
Congrés: Frontiers in the Simulation of Macromolecules
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 22- **Codi:** 069861 **Tipus de participació:** Poster (*PIQUERAS GARCIA, CARMEN*)
Any: 2010 **Títol:** deeply doped polyacetylenes with attached carborane counterions
Autors: J. Michl, R. Crespo, M.C. Piqueras **Caràcter:** Internacional
Congrés: 50th Sanibel Symposium
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 23- **Codi:** 069862 **Tipus de participació:** Ponència invitada (*PIQUERAS GARCIA, CARMEN*)
Any: 2010 **Títol:** theoretical advances on the design of deeply doped polyacetylenes with attached carborane counterions
Autors: R. Crespo, M.C. Piqueras **Caràcter:** Internacional
Congrés: Department of Chemistry and Biochemistry Seminars. University of Colorado at Boulder
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada
-
- 24- **Codi:** 071637 **Tipus de participació:** Poster (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2010 **Títol:** Molecular mechanism of the hydrolysis of beta-lactams antibiotics from QM/MM studies
Autors: C. Meliá, S. Ferrer, V. Moliner, J. Bertrán, I. Tuñón **Caràcter:** Internacional
Congrés: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications.
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings
-
- 25- **Codi:** 071638 **Tipus de participació:** Ponència invitada (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2010 **Títol:** What can computational chemistry tell us about evolution? The case of the Alkaline Phosphatase superfamily
Autors: I. Tuñón **Caràcter:** Internacional
Congrés: Biophysics 2010
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada
-
- 26- **Codi:** 076240 **Tipus de participació:** Poster (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2010 **Títol:** A Theoretical Study of the Dynamic Effects in Formate Dehydrogenase
Autors: M. Oliva, R. Castillo, M. Roca, V. Moliner, I. Tuñón **Caràcter:** Internacional
Congrés: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications.
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional sense Proceedings
-