

Tesis Dirigides

- 1- **Codi:** 019025 **Clau:** Tesi Doctoral (*GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2012 **Títol:** Azul de Prusia depositado por vías química y electroquímica.
Autor: PAU REIG RODRIGO **Director:** Francisco Vicente, Claude Gabrielli, José J. García Jareño y Hubert Perrot
Qualificació: Excel·lent cum laude
Classificació: Tesis doctoral Excelent Cum Laude
-



Articles en Revistes

- 1- **Codi:** 088364 **Clau:** Article (*AULLO I REVERTE, JOSEP MARIA*)
Any: 2012 **Autors:** G. Arteca, J. M. AULLO, O. TAPIA
Títol: Constructing quantum mechanical models starting from diabatic schemes: Quantum states for simulations bond break/formation I. Feshbach-like quantum states and electronuclear wave functions
Revista: 908391 - Journal of Mathematical Chemistry
Informació adicional: **Volum:** 50 **Número:** **Pàgina inicial:** 949 **Pàgina final:** 970 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 2- **Codi:** 087954 **Clau:** Article (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO*)
Any: 2012 **Autors:** Esteve V, Celda B, Martínez-Bisbal MC
Títol: Use of ¹H and ³¹P HRMAS to evaluate the relationship between quantitative alterations in metabolite concentrations and tissue features in human brain tumour biopsies
Revista: 911086 - Analytical and Bioanalytical Chemistry
Informació adicional: **Volum:** **Número:** **Pàgina inicial:** **Pàgina final:** **Data de publicació:** 03/05/2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 3- **Codi:** 087955 **Clau:** Article (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO*)
Any: 2012 **Autors:** Anca Ramona Croitor Sava, M. Carmen Martínez-Bisbal, Diana Maria Sima, Jorge Calvar, Vicente Esteve, Bernardo Celda, Uwe Himmelreich and Sabine Van Huffel
Títol: Quantifying brain tumor tissue abundance in HR-MAS spectra using non-negative blind source separation techniques
Revista: 908400 - Journal of Chemometrics
Informació adicional: **Volum:** **Número:** **Pàgina inicial:** **Pàgina final:** **Data de publicació:** 19/06/2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 4- **Codi:** 087956 **Clau:** Article (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO*)
Any: 2012 **Autors:** Julià-Sapé M, Lurgi M, Mier M, Estanyol F, Rafael X, Candiota AP, Barceló A, García A, Martínez-Bisbal MC, Ferrer-Luna R, Moreno-Torres Á, Celda B, Arús C
Títol: Strategies for annotation and curation of translational databases: the eTUMOUR project.
Revista: 904437 - Database
Informació adicional: **Volum:** **Número:** **Pàgina inicial:** **Pàgina final:** **Data de publicació:** 22/11/2012
Classificació: Altres
-
- 5- **Codi:** 088283 **Clau:** Article (*CRESPO CRESPO, RAUL*)
Any: 2012 **Autors:** A. Wahab, B. Stepp, C. Douvris, M. Valasek, J. Stursa, J. Klima, M.C. Piqueras, R. Crespo, J. Ludvik, J. Michl
Títol: Measured and Calculated Oxidation Potentials of 1-X-12-Y-CB11Me10₆ Anions
Revista: 900752 - Inorganic Chemistry
Informació adicional: **Volum:** 51 **Número:** 9 **Pàgina inicial:** 5128 **Pàgina final:** 5137 **Data de publicació:** 18/04/2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 6- **Codi:** 081217 **Clau:** Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE*)
Any: 2012 **Autors:** M.C.Vega; M.Rolón; A.Montero-Torres;C. Fonseca-Berzal;J.A. Escario; A. Gómez-Barrio; J. Gálvez; Y. Marrero-Ponce; V. J. Arán
Títol: Synthesis, biological evaluation and chemometric analysis of indazole derivatives.1,2-Disubstituted 5-nitroindazolinones, new prototypes of antichagasic drugs
Revista: 904356 - European Journal of Medicinal Chemistry
Informació adicional: **Volum:** **Número:** 58 **Pàgina inicial:** 214 **Pàgina final:** 227 **Data de publicació:** 16/10/2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-

- 7- **Codi:** 081222 **Clau:** Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE*)
Any: 2012 **Autors:** Y.G. Bushuev ; G. Sastre;J.V. de Julián-Ortiz; J. Galvez
Títol: Water−Hydrophobic Zeolite Systems
Revista: 914198 - Journal Of Physical Chemistry C
Informació adicional: **Volum:** 116 **Número:** 47 **Pàgina inicial:** 24916 **Pàgina final:** 24929 **Data de publicació:** 12/2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 8- **Codi:** 081224 **Clau:** Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE*)
Any: 2012 **Autors:** J. Galvez
Títol: A graph-theoretical approach to calculate vibrational energies of atomic and subatomic systems
Revista: 312415 - Open Journal of Physical Chemistry
Informació adicional: **Volum:** 2 **Número:** **Pàgina inicial:** 204 **Pàgina final:** 211 **Data de publicació:** 26/11/2012
Classificació: Article Àmbit Internacional
-
- 9- **Codi:** 071018 **Clau:** Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA*)
Any: 2012 **Autors:** Jorge Galvez ; María Galvez-Llompарт ; Ramón García-Domenech.
Títol: Molecular topology as a novel approach for drug discovery
Revista: 915352 - Expert Opinion On Drug Discovery
Informació adicional: **Volum:** 7 **Número:** 2 **Pàgina inicial:** 133 **Pàgina final:** 153 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article ISI al 3er quartil
-
- 10- **Codi:** 081805 **Clau:** Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA*)
Any: 2012 **Autors:** María Galvez-Llompарт ; Jorge Galvez ; Ramón García-Domenech ;Lemont B. Kier.
Títol: Modeling Drug-Induced Anorexia by Molecular Topology.
Revista: 913199 - Journal Of Chemical Information And Modeling
Informació adicional: **Volum:** 52 **Número:** **Pàgina inicial:** 1337 **Pàgina final:** 1344 **Data de publicació:** 19/04/2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 11- **Codi:** 084775 **Clau:** Article (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA*)
Any: 2012 **Autors:** Jorge Gálvez ; María Gálvez-Llompарт ; Ramón García-Domenech
Títol: Introduction to Molecular Topology: Basic Concepts and Application to Drug Design
Revista: 914583 - Current Computer-Aided Drug Design
Informació adicional: **Volum:** 8 **Número:** 3 **Pàgina inicial:** 196 **Pàgina final:** 223 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 12- **Codi:** 084774 **Clau:** Article (*GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2012 **Autors:** Gerardo M. Casañola-Martín; Mahmud Tareq Hassan Khan; Huong Le-Thi-Thu; Yovani Marrero-Ponce; Ramón García-Domenech; Francisco Torrens and Antonio Rescigno
Títol: Retrained Classification of Tyrosinase Inhibitors and ζ In Silico ζ Potency Estimation by Using Atom-Type Linear Indices: A Powerful Tool for Speed up the Discovery of Leads
Revista: 310590 - International Journal of Chemoinformatics and Chemical Engineering
Informació adicional: **Volum:** 2 **Número:** 2 **Pàgina inicial:** 42 **Pàgina final:** 144 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article Àmbit Internacional
-
- 13- **Codi:** 084776 **Clau:** Article (*GARCIA DOMENECH, RAMON*)
Any: 2012 **Autors:** Juan Alberto Castillo Garit; Ramón García Domenech; Yiovani Marrero Ponce; Francisco Torrens Zaragoza and Consuelo Abad Mazarío
Títol: Prediction of the Binding Affinity between Fenoterol Derivatives and the β_2 -Adrenergic Receptor Using Atom-Based 3D-Chiral Linear Indices
Revista: 309784 - Nereis
Informació adicional: **Volum:** 4 **Número:** **Pàgina inicial:** 9 **Pàgina final:** 18 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article Àmbit Nacional

- 14- **Codi:** 084777 **Clau:** Article (*GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA*)
Any: 2012 **Autors:** Boris Guzmán Fernández; Riccardo Zanni; Marina Pellicer; Maria Galvez-Llompert and Ramón Garcia-Domenech
Títol: Aplicación de la topología molecular en la búsqueda de nuevos compuestos derivados del 4-nitro-imidazol activos frente al *Tripanosoma brucei*.
Revista: 913565 - Anales de la Real Academia Nacional de Farmacia
Informació adicional: **Volum:** 78 **Número:** 4 **Pàgina inicial:** 447 **Pàgina final:** 462 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article ISI al 4rt quartil
-
- 15- **Codi:** 081044 **Clau:** Article (*GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2012 **Autors:** L. To Thi Kim; C. Gabrielli; H. Perrot; J. Garcia-Jareno; F. Vicente
Títol: Redox switching of Prussian blue thin films investigated by ac-electrogravimetry
Revista: 901127 - Electrochimica Acta
Informació adicional: en prensa **Volum:** 84 **Número:** **Pàgina inicial:** 35 **Pàgina final:** 48 **Data de publicació:** 01/12/2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 16- **Codi:** 060848 **Clau:** Article (*MONZO MANSANET, ISIDRO*)
Any: 2012 **Autors:** Francisco Torrens, Clara M. Gómez, Isidro s Monzó, Concepción Abad y Agustín Campos
Títol: Modelling monomer/disc composites phase behaviour
Revista: 908796 - Macromolecular Symposia
Informació adicional: **Volum:** 311 **Número:** **Pàgina inicial:** 49 **Pàgina final:** 56 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Altres
-
- 17- **Codi:** 083592 **Clau:** Article (*MONZO MANSANET, ISIDRO*)
Any: 2012 **Autors:** David Giménez Romero; Miguel A. González-Martínez; Maria-Jesús Bañuls; Isidro S. Monzó, Rosa Puchades; and Ángel Maquieira.
Títol: Modeling of role of conformational dynamics in kinetics of the antigen-antibody interaction in heterogeneous phase.
Revista: 909613 - Journal of Physical Chemistry B
Informació adicional: **Volum:** 116 **Número:** **Pàgina inicial:** 5679 **Pàgina final:** 5688 **Data de publicació:** 23/04/2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 18- **Codi:** 070010 **Clau:** Article (*PASCUAL-AHUIR GINER, JUAN LUIS; TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ROCA MOLINER, MARIA TERESA*)
Any: 2012 **Autors:** M. Roca; J. L. Pascual-Ahuir; I. Tuñón
Títol: Reversibility and Diffusion in Mandelythiamin Decarboxylation. Searching Dynamical Effects in Decarboxylation Reactions
Revista: 900665 - Journal of the American Chemical Society
Informació adicional: **Volum:** 134 **Número:** **Pàgina inicial:** 10509 **Pàgina final:** 10514 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 19- **Codi:** 088284 **Clau:** Article (*PIQUERAS GARCIA, CARMEN*)
Any: 2012 **Autors:** A. Wahab, B. Stepp, C. Douvris, M. Valasek, J. Stursa, J. Klima, M.C. Piqueras, R. Crespo, J. Ludvik, J. Michl
Títol: Measured and Calculated Oxidation Potentials of 1-X-12-Y-CB11Me10₆ Anions
Revista: 900752 - Inorganic Chemistry
Informació adicional: **Volum:** 51 **Número:** 9 **Pàgina inicial:** 5128 **Pàgina final:** 5137 **Data de publicació:** 18/04/2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 20- **Codi:** 085729 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2012 **Autors:** L. Fernandez, I. Tuñón, J. Latorre, C. Guillem, A. Beltrán, P. Amorós
Títol: Tetraethylorthosilicate as Molecular Precursor to the Formation of Amorphous Silica Networks. A DFT-SCRF Study of the Base Catalyzed Hydrolysis
Revista: 909303 - Journal of Molecular Modeling
Informació adicional: **Volum:** 18 **Número:** **Pàgina inicial:** 3301 **Pàgina final:** 3310 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article ISI al 2on quartil

- 21- **Codi:** 085730 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2012 **Autors:** K. Zinovjev, S. Martí, I. 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:** **Pàgina inicial:** 1795 **Pàgina final:** 1801 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 22- **Codi:** 085731 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2012 **Autors:** J. Javier Ruiz-Pernía, S. Martí, V. Moliner, I. Tuñón
Títol: A Novel Strategy to Study Electrostatic Effects in Chemical Reactions: Differences between the Role of Solvent and the Active Site of Chalcone ISomerase in a Michael Addition
Revista: 913200 - Journal Of Chemical Theory And Computation
Informació adicional: **Volum:** 8 **Número:** **Pàgina inicial:** 1532 **Pàgina final:** 1535 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 23- **Codi:** 085732 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2012 **Autors:** S. Ferrer, S. Martí, V. Moliner, I. Tuñón, J. Bertrán
Títol: Understanding the different activities of highly promiscuous MbtI by computational methods
Revista: 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics
Informació adicional: **Volum:** 14 **Número:** **Pàgina inicial:** 3482 **Pàgina final:** 3489 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 24- **Codi:** 085733 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2012 **Autors:** A. J. Mulholland, A. E. Roitberg, I. Tuñón
Títol: Enzyme dynamics and catalysis in the mechanism of DNA polymerase
Revista: 909714 - Theoretical Chemistry Accounts
Informació adicional: **Volum:** 131 **Número:** **Pàgina inicial:** 1286 **Pàgina final:** 1289 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 25- **Codi:** 085734 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2012 **Autors:** K. Swiderek, I. Tuñón, S. Martí, V. Moliner, J. Bertrán
Títol: Do zwitterionic species exist in the non-enzymatic peptide bond formation?
Revista: 909184 - Chemical Communications
Informació adicional: **Volum:** 48 **Número:** **Pàgina inicial:** 11253 **Pàgina final:** 11255 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 26- **Codi:** 089019 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2012 **Autors:** C. Meliá, S. Ferrer, V. Moliner, I. Tuñón, J. Bertrán
Títol: Computational Study on Hydrolysis of Cefotaxime in Gas Phase and in Aqueous Solution
Revista: 900660 - Journal of Computational Chemistry
Informació adicional: **Volum:** 33 **Número:** **Pàgina inicial:** 1948 **Pàgina final:** 1959 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 27- **Codi:** 070121 **Clau:** Article (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ARANDA MORATALLA, JUAN; ROCA MOLINER, MARIA TERESA*)
Any: 2012 **Autors:** J. Aranda; M. Roca; I. Tuñón
Títol: Substrate Promiscuity in DNA Methyltransferase M.PvuII. A Mechanistic Insight
Revista: 912818 - Organic & Biomolecular Chemistry
Informació adicional: **Volum:** 10 **Número:** **Pàgina inicial:** 5395 **Pàgina final:** 5400 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil

-
- 28- **Codi:** 085065 **Clau:** Article (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ARANDA MORATALLA, JUAN; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)
Any: 2012 **Autors:** M. Roca; J. Aranda; V. Moliner; I. Tuñón
Títol: Modeling methods for studying post-translational and transcriptional modifying enzymes
Revista: 909464 - Current Opinion in Chemical Biology
Informació adicional: **Volum:** 16 **Número:** **Pàgina inicial:** 465 **Pàgina final:** 471 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 29- **Codi:** 079315 **Clau:** Article (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; LOPEZ CANUT, VIOLETA; RUIZ PERNIA, JOSE JAVIER)
Any: 2012 **Autors:** V. Lopez-Canut, J. J. Ruiz-Pernía R. Castillo, V. Moliner and I. Tuñón
Títol: Hydrolysis of Phosphotriesters: A Theoretical Analysis of the Enzymatic and Solution Mechanisms
Revista: 908895 - Chemistry-A European Journal
Informació adicional: **Volum:** 18 **Número:** 31 **Pàgina inicial:** 9612 **Pàgina final:** 9621 **Data de publicació:** 26/06/2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 30- **Codi:** 073941 **Clau:** Article (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2012 **Autors:** Agrisuelas, Jeronimo; Garcia-Jareño, Jose Juan; Vicente, Francisco
Títol: Identification of Processes Associated with Different Iron Sites in the Prussian Blue Structure by in Situ Electrochemical, Gravimetric, and Spectroscopic Techniques in the dc and ac Regimes
Revista: 914198 - Journal Of Physical Chemistry C
Informació adicional: **Volum:** 116 **Número:** **Pàgina inicial:** 1935 **Pàgina final:** 1947 **Data de publicació:** 2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 31- **Codi:** 080745 **Clau:** Article (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2012 **Autors:** J. Agrisuelas; C. Gabrielli; J. J. García-Jareño; H. Perrot; F. Vicente
Títol: Kinetic and Mechanistic Aspects of a Poly(o-toluidine)-Modified Gold Electrode. 1. Simultaneous Cyclic Spectroelectrochemistry and Electrogravimetry Studies in H2SO4 Solutions
Revista: 914198 - Journal Of Physical Chemistry C
Informació adicional: **Volum:** 116 **Número:** 29 **Pàgina inicial:** 15620 **Pàgina final:** 15629 **Data de publicació:** 12/06/2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 32- **Codi:** 080746 **Clau:** Article (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2012 **Autors:** J. Agrisuelas; C. Gabrielli; J. J. García-Jareño; H. Perrot; F. Vicente
Títol: Kinetic and Mechanistic Aspects of a Poly(o-Toluidine)-Modified Gold Electrode. 2. Alternating Current Electrogravimetry Study in H2SO4 Solutions
Revista: 914198 - Journal Of Physical Chemistry C
Informació adicional: **Volum:** 116 **Número:** 29 **Pàgina inicial:** 15630 **Pàgina final:** 15640 **Data de publicació:** 12/06/2012
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-

Capítols de Llibres i altres publicacions

- 1- **Codi:** 049955 **Clau:** Capítol de llibre (*AGRISUELAS VALLES, JERONIMO*)
Any: 2011 **Títol:** Algunas aplicaciones de la microbalanza electroquímica de cuarzo
Autors: J. Agrisuelas; J.J. García-Jareño; F. Vicente
Llibre: Libro de resúmenes del XXXII Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química y XIII Encontro Ibérico de Electroquímica
ISBN: 978-84-15107-22-4
Classificació: Capítol en llibre nacional

- 2- **Codi:** 049956 **Clau:** Capítol de llibre (*AGRISUELAS VALLES, JERONIMO*)
Any: 2011 **Títol:** Caracterización de films electrodepositados de azul de Prusia mediante espectroscopias simultáneas de impedancia eléctrica, de masa y de color
Autors: J. Agrisuelas; J.J. García-Jareño; F. Vicente
Llibre: Libro de resúmenes del XXXII Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química y XIII Encontro Ibérico de Electroquímica
ISBN: 978-84-15107-22-4
Classificació: Capítol en llibre nacional

- 3- **Codi:** 049957 **Clau:** Capítol de llibre (*AGRISUELAS VALLES, JERONIMO*)
Any: 2011 **Títol:** Electrogravimetria de corriente alterna de poli-(Azure A)
Autors: J. Agrisuelas; C. Gabrielli; J.J. García-Jareño; H. Perrot; F. Vicente
Llibre: Libro de resúmenes del XXXII Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química y XIII Encontro Ibérico de Electroquímica
ISBN: 978-84-15107-22-4
Classificació: Capítol en llibre nacional

- 4- **Codi:** 049958 **Clau:** Capítol de llibre (*AGRISUELAS VALLES, JERONIMO*)
Any: 2011 **Títol:** Seguimiento electroquímico y mediante EQCM del efecto del NH₄Cl en la estabilización del azul de Prusia
Autors: J. Agrisuelas, C. Delgado, J.J. García-Jareño, F. Vicente
Llibre: Libro de resúmenes del XXXII Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química y XIII Encontro Ibérico de Electroquímica
ISBN: 978-84-15107-22-4
Classificació: Capítol en llibre nacional

- 5- **Codi:** 051989 **Clau:** Capítol de llibre (*MONZO MANSANET, ISIDRO*)
Any: 2012 **Títol:** Monitorización en tiempo real de la interacción ArtinM-glicoproteína: Un modelo cinético detallado.
Autors: I.S. Monzó, D. Giménez-Romero, N.C. Pesquero, P.R. Bueno, A. Maquieira, R. Puchades.
Llibre: Libro de Resúmenes del VI Workshop on Sensors and Molecular Recognition en CD Capítulo 36 de 60 totales.
ISBN: 978-84-695-5262-9
Classificació: Capítol en llibre nacional

Participació en Congressos i Reunions Científiques

-
- 1- **Codi:** 099099 **Tipus de participació:** Ponència (*ARANDA MORATALLA, JUAN*)
Any: 2012 **Títol:** Methylation in N6-MTases: Classical Molecular Dynamics and QM/MM Free Energy Profiles
Autors: J. Aranda
Caràcter: Internacional
Congrés: ESPA 2012, Joint European Doctorate in Theoretical Chemistry and Computational Modeling
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacional
-
- 2- **Codi:** 103428 **Tipus de participació:** Ponència (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO*)
Any: 2012 **Títol:** NMR microscopy and spectroscopy in a single neurosphere
Autors: B Celda, M Martinez-Bisbal, V Esteve
Caràcter: Internacional
Congrés: Contrast-Enhanced Biomedical Imaging 2013
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacional
-
- 3- **Codi:** 103429 **Tipus de participació:** Ponència (*CELDA MUÑOZ, BERNARDO*)
Any: 2012 **Títol:** Alteraciones genómicas, transcriptómicas y metabólicas en tumores cerebrales
Autors: B Celda
Caràcter: Nacional
Congrés: Actualización y evidencias en neuro-oncología
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Nacional
-
- 4- **Codi:** 103820 **Tipus de participació:** Poster (*CRESPO CRESPO, RAUL*)
Any: 2012 **Títol:** oxidation potentials of halogenated carborane anions
Autors: R. Crespo, M.C. Piqueras, J. Michl
Caràcter: Internacional
Congrés: 14th ICQC international congress of quantum chemistry
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 5- **Codi:** 103821 **Tipus de participació:** Poster (*CRESPO CRESPO, RAUL*)
Any: 2012 **Títol:** [CB11XnY12-n]-: Anions with adjustable oxidation potentials
Autors: M.C. Piqueras, R. Crespo, J. Michl
Caràcter: Internacional
Congrés: 14th ICQC international congress of quantum chemistry
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 6- **Codi:** 094686 **Tipus de participació:** Comunicació (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE*)
Any: 2011 **Títol:** Molecular Topology as Novel Approach in Alzheimer's Disease Drug Discovery
Autors: J. Wang; D. Land; J. Galvez; G. Pasinetti
Caràcter: Internacional
Congrés: 63rd Annual meeting of the american academy of neurology
Publicació: Proceedings
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional
-

-
- 7- **Codi:** 094687 **Tipus de participació:** Comunicació (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE*)
Any: 2012 **Títol:** Some new applications of graph eigenvalues and spectral moments.
Autors: J. Galvez ; R. Garcia-Domenech
Caràcter: Internacional
Congrés: IAMC 2012 meeting and Environmental Chemoinformatics, ECO, Summer School 2012.
Publicació:
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional
-
- 8- **Codi:** 098642 **Tipus de participació:** Poster (*GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA*)
Any: 2012 **Títol:** New compounds against ulcerative colitis through molecular topology.
Autors: M. Galvez-Llompарт; M. Recio and R. Garcia-Domenech
Caràcter: Internacional
Congrés: European Crohn's and Colitis Organisation Congress
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 9- **Codi:** 099102 **Tipus de participació:** Poster (*MONZO MANSANET, ISIDRO*)
Any: 2012 **Títol:** Monitorización en tiempo real de la interacción ArtinM-glicoproteina: un modelo cinético detallado.
Autors: I.S. Monzó, D. Giménez-Romero, N. C. Pesquero, P.R. Bueno, A. Maquieira, R. Puchades.
Caràcter: Nacional
Congrés: VI Workshop on Sensors and Molecular Recognition
Publicació: 5 y 6 de julio de 2012
Classificació: Pòster a Congrés Nacional
-
- 10- **Codi:** 080037 **Tipus de participació:** Poster (*PASCUAL-AHUIR GINER, JUAN LUIS; TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ROCA MOLINER, MARIA TERESA*)
Any: 2012 **Títol:** Reversibility and Diffusion in Mandelythiamin Decarboxylation in Aqueous Solution. QM/MM Molecular Dynamics Simulations
Autors: M. Roca, J. L. Pascual-Ahuir, I. Tuñon
Caràcter: Internacional
Congrés: Isotopes in Biological & Chemical Sciences
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 11- **Codi:** 103822 **Tipus de participació:** Poster (*PIQUERAS GARCIA, CARMEN*)
Any: 2012 **Títol:** Oxidation potentials of halogenated carborane anions
Autors: R. Crespo, M.C. Piqueras, J. Michl
Caràcter: Internacional
Congrés: 14th ICQC international congress of quantum chemistry
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 12- **Codi:** 103823 **Tipus de participació:** Poster (*PIQUERAS GARCIA, CARMEN*)
Any: 2012 **Títol:** [CB11XnY12-n]-: anions with adjustable oxidation potentials
Autors: M.C. Piqueras, R. Crespo, J. Michl
Caràcter: Internacional
Congrés: 14th ICQC international congress of quantum chemistry
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-

-
- 13- **Codi:** 099493 **Tipus de participació:** Poster (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2011 **Títol:** Enzyme Catalyzed Transesterification Reaction in Organic Media
Autors: A. Fogarty, J. J. Ruiz-Pernía, I. Tuñón, D. Laage
Caràcter: Internacional
Congrés: World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2011)
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 14- **Codi:** 099644 **Tipus de participació:** Ponència (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2012 **Títol:** Dissecting the Role of Entropy in Catalysis through Simulations. Chorismate Mutase Revisited
Autors: J. J. Ruiz Pernía, S. Martí, V. Moliner, I. Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: ESPA 2012, Joint European Doctorate in Theoretical Chemistry and Computational Modeling
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacional
-
- 15- **Codi:** 099645 **Tipus de participació:** Ponència invitada (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2012 **Títol:** Dynamical effects in enzymatic catalysis
Autors: I. Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: Advances in Quantum Chemistry: Interfacing Electronic Structure with Dynamics
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada àmbit Internacional
-
- 16- **Codi:** 099647 **Tipus de participació:** Poster (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2012 **Títol:** Réaction enzymatique en milieu organique - l'influence de l'environnement
Autors: A. Fogarty, J. J. Ruiz-Pernía, I. Tuñón, D. Laage
Caràcter: Internacional
Congrés: XIII Recontre de Chmites Théoriciens Francophones
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 17- **Codi:** 099648 **Tipus de participació:** Ponència invitada (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2012 **Títol:** Dynamical effects in enzymatic catalysis. Do they invalidate Transition State Theory?
Autors: I. Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: 21st IUPAC International Conference on Physical Organic Chemistry
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada àmbit Internacional
-
- 18- **Codi:** 105118 **Tipus de participació:** Poster (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2012 **Títol:** Collective variable for rapid investigation of enzymatic activity
Autors: K. Zinovjev, S. Martí, I. Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: ESPA 2012
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-

-
- 19- **Codi:** 098902 **Tipus de participació:** Poster (TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ARANDA MORATALLA, JUAN; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)
Any: 2012 **Títol:** Molecular Mechanism and Long Molecular Dynamic Simulation of TaqI N6-Adenine-Methyltransferase
Autors: Juan Aranda, María Sanchez Tarín, Maite Roca, Iñaki Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: VIIIth Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2012
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 20- **Codi:** 099089 **Tipus de participació:** Poster (TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; GARCIA MESEGUER, RAFAEL)
Any: 2012 **Títol:** Implementation of a solvent coordinate for QM/MM simulations of hydride transfer in Formate Dehydrogenase
Autors: R. García-Meseguer; I. Tuñón; D. Laage; J. T. Hynes; S. Martí and J. J. Ruiz-Pernía.
Caràcter: Internacional
Congrés: ESPA 2012
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 21- **Codi:** 098901 **Tipus de participació:** Poster (TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)
Any: 2012 **Títol:** Enzyme Evolution: Enzyme promiscuity in enolase superfamily
Autors: María Sanchez Tarín, Maite Roca, Iñaki Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: VIIIth Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2012
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 22- **Codi:** 099646 **Tipus de participació:** Ponència invitada (TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)
Any: 2012 **Títol:** Dynamical Effects in Enzymatic Catalysis. Do we need new theories to understand enzymatic reactions?
Autors: I. Tuñón, M. Roca, J. J. Ruiz-Pernía, V. Moliner
Caràcter: Internacional
Congrés: XIII Rencontre de Chimistes Théoriciens Francophones
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada àmbit Internacional
-
- 23- **Codi:** 099649 **Tipus de participació:** Comunicació (TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)
Any: 2012 **Títol:** Kinetic isotope effects for wild-type and mutant methyltransferases: a computational critique of active-site compaction
Autors: M. Roca, M. Sato, V. Moliner, I. Tuñón, I. H. Williams
Caràcter: Internacional
Congrés: 21st IUPAC International Conference on Physical Organic Chemistry
Publicació:
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional
-
- 24- **Codi:** 094281 **Tipus de participació:** Ponència (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2012 **Títol:** COMPOSITE TERMOPLÁSTICO+GRAFITO+METAL
Autors: Jerónimo Agrisuelas; José V. Armijo; Carla Delgado; José J. García-Jareño; Manuel Piedras; Francisco Vicente
Caràcter: Nacional
Congrés: XXXIII Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Nacional
-

-
- 25- **Codi:** 094282 **Tipus de participació:** Poster (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2012 **Títol:** Intercambio de iones en el proceso de reducción de azul de Prusia
Autors: Jerónimo Agrisuelas; José J. García-Jareño; Carla Delgado; Rosa Valero; Francisco Vicente
Caràcter: Nacional
Congrés: XXXIII Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Nacional
-
- 26- **Codi:** 094283 **Tipus de participació:** Poster (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2012 **Títol:** Amarillo de Prusia sobre electrodo de ITO
Autors: Jerónimo Agrisuelas; José J. García-Jareño; Carmen Moreno; Antoni Roig; Francisco Vicente
Caràcter: Nacional
Congrés: XXXIII Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Nacional
-
- 27- **Codi:** 094284 **Tipus de participació:** Poster (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2012 **Títol:** Dispersión de micropartículas en Ni y Cu en una matriz EVA+Grafito
Autors: Jerónimo Agrisuelas; Montse Buaki; Lara Fort; Bonifacio Manguire; Manuel Piedras; Kamila Jedrucka; José J. García-Jareño; Francisco Vicente.
Caràcter: Nacional
Congrés: XXXIII Reunión del Grupo de Electroquímica de la Real Sociedad Española de Química
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Nacional
-
- 28- **Codi:** 094285 **Tipus de participació:** Ponència (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2012 **Títol:** Identification of electroactive sites in Prussian Yellow films
Autors: J. Agrisuelas; C. Moreno-Guerrero; J.J. García-Jareño; A. San Matias; F. Vicente
Caràcter: Internacional
Congrés: 9th INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON ELECTROCHEMICAL MICRO & NANOSYSTEM TECHNOLOGY
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacional
-
- 29- **Codi:** 094286 **Tipus de participació:** Poster (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2012 **Títol:** EVA/Metal/Graphite and polypropylene/Metal/Graphite composite electrodes
Autors: J. Agrisuelas; J.V. Armijo; J.J. García-Jareño; M.I. Llop; M. Piedras; F. Vicente
Caràcter: Internacional
Congrés: 9th INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON ELECTROCHEMICAL MICRO & NANOSYSTEM TECHNOLOGY
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 30- **Codi:** 094287 **Tipus de participació:** Ponència (VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN)
Any: 2012 **Títol:** In situ spectroelectrochemistry and electrogravimetry of electrochromic polymers in the ac-regime
Autors: J. Agrisuelas; C. Delgado; J.J. García-Jareño; F. Vicente
Caràcter: Internacional
Congrés: ISE Satellite Meeting 'Spectroelectrochemistry 2012'
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacional
-

-
- 31- **Codi:** 094288 **Tipus de participació:** Poster (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSÉ JUAN*)
Any: 2012 **Títol:** Color changes during voltammograms of Prussian Yellow on ITO electrode
Autors: J. Agrisuelas; J.J. García-Jareño; C. Moreno; A. Roig; F. Vicente
Caràcter: Internacional
Congrés: Pacific RIM Meeting on Electrochemical and solid-state science PRiME 2012
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 32- **Codi:** 094289 **Tipus de participació:** Poster (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSÉ JUAN*)
Any: 2012 **Títol:** Characterization of a new polypropylene+graphite+zinc ternary composite
Autors: J. Agrisuelas; J.J. García-Jareño; M.I. Llop; M. Piedras; F. Vicente
Caràcter: Internacional
Congrés: Pacific RIM Meeting on Electrochemical and solid-state science PRiME 2012
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 33- **Codi:** 094290 **Tipus de participació:** Ponència (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSÉ JUAN*)
Any: 2012 **Títol:** Prussian Blue films in ammonium aqueous solution
Autors: J. Agrisuelas; C. Delgado; J.J. García-Jareño; F. Vicente
Caràcter: Internacional
Congrés: Pacific RIM Meeting on Electrochemical and solid-state science PRiME 2012
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacional
-

