

Tesis Dirigides

- 1- **Codi:** 027718 **Clau:** Tesi Doctoral amb Menció Internacional (*GALVEZ ALVAREZ, JORGE*)
Any: 2015 **Títol:** Diseño por topología molecular y ensayos farmacológicos de nuevos inhibidores frente a Wnt/beta-catenina y PI3K/Akt/mTOR.
Autor: Riccardo Zanni **Director:** Maria del Carmen Recio Iglesias y Jorge Galvez Alvarez **Qualificació:** Apte cum laude
Classificació: Tesis doctoral amb Menció Internacional apte cum laude
-
- 2- **Codi:** 027477 **Clau:** Tesi Doctoral (*TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ARANDA MORATALLA, JUAN; ROCA MOLINER, MARIA TERESA*)
Any: 2015 **Títol:** Estudio computacional de ADN-Metiltransferasas. Análisis del mecanismo epigenético de metilación del ADN.
Autor: Juan Aranda Moratalla **Director:** Iñaki Tuñón y María Teresa Roca **Qualificació:** Excel-lent cum laude
Classificació: Tesis doctoral Excelent Cum Laude
-



Articles en Revistes

- 1- **Codi:** 102312 **Clau:** Article (GALVEZ ALVAREZ, JORGE)
Any: 2015 **Autors:** Carolina L Bellera; Darío E Balcazar; M Cristina Vanrell; A Florencia Casassa; Pablo H Palestro; Luciana Gavernet; Carlos A Labriola; Jorge Gálvez; Luis E Bruno-Blanch; Patricia S Romano; Carolina ...
Títol: Computer-guided drug repurposing: Identification of trypanocidal activity of clofazimine, benidipine and saquinavir
Revista: 904356 - European Journal of Medicinal Chemistry
Informació adicional: Volum: 93 Número: C Pàgina inicial: 338 Pàgina final: 348 **Data de publicació:** 02/2015
Classificació: Article ISI al 1er quartil

- 2- **Codi:** 102311 **Clau:** Article (GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA)
Any: 2015 **Autors:** Garcia-Domenech R; Zanni R; Galvez-Llompарт M; Galvez J.
Títol: Predicting antiprotozoal activity of benzyl phenyl ether diamine derivatives through QSAR multi-target and molecular topology
Revista: 909338 - Molecular Diversity
Informació adicional: Volum: 19 Número: 2 Pàgina inicial: 357 Pàgina final: 366 **Data de publicació:** 10/03/2015
Classificació: Article ISI al 2on quartil

- 3- **Codi:** 110961 **Clau:** Article (GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA)
Any: 2015 **Autors:** José Rafael Bretón Martínez; Cinthia Delma Torrico Ovando; Nayra Torrico Ovando; María Gálvez-Llompарт; Jorge Gálvez Álvarez; Ramón García-Domenech
Títol: Aplicación de topología molecular a la predicción de la actividad frente a Trypanosoma brucei rhodesiense de compuestos bicíclicos derivados de la 4-metilpiperazina
Revista: 309784 - Nereis
Informació adicional: Volum: 7 Número: Pàgina inicial: 27 Pàgina final: 37 **Data de publicació:** 10/03/2015
Classificació: Article a Revista amb Comitè de selecció

- 4- **Codi:** 107651 **Clau:** Article (GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA; ZANNI, RICCARDO)
Any: 2015 **Autors:** Zanni R, Galvez-Llompарт M, García-Domenech R, Galvez J
Títol: Latest advances in molecular topology applications for drug discovery.
Revista: 915352 - Expert Opinion On Drug Discovery
Informació adicional: Volum: 10 Número: 9 Pàgina inicial: 945 Pàgina final: 957 **Data de publicació:** 02/07/2015
Classificació: Article ISI al 1er quartil

- 5- **Codi:** 107652 **Clau:** Article (GALVEZ ALVAREZ, JORGE; GARCIA DOMENECH, RAMON; GALVEZ LLOMPART, MARIA; ZANNI, RICCARDO)
Any: 2015 **Autors:** Zanni R; Galvez-Llompарт M; Morell C; Rodríguez-Henche N; Díaz-Laviada I; Recio-Iglesias MC; Garcia-Domenech R; Galvez J.
Títol: Novel cancer chemotherapy hits by molecular topology: dual Akt and Beta-catenin inhibitors.
Revista: 915133 - Plos One
Informació adicional: Volum: 10 Número: 4 Pàgina inicial: 1 Pàgina final: 32 **Data de publicació:** 24/04/2015
Classificació: Article ISI al 1er quartil

- 6- **Codi:** 110960 **Clau:** Article (GARCIA DOMENECH, RAMON)
Any: 2015 **Autors:** Juan A. Castillo-Garít; Yovani Marrero-Ponce; Stephen J. Barigye; Ricardo Medina-Marrero; Milagros G. Bernal; José M. G. de la Vega; Francisco Torrens; Vicente J. Arán; Facundo Pérez-Giménez; Ramón ...
Títol: In silico Antibacterial Activity Modeling Based on the TOMOCOMD-CARDD Approach
Revista: 909622 - Journal of the Brazilian Chemical Society
Informació adicional: Volum: 26 Número: 6 Pàgina inicial: 1218 Pàgina final: 1226 **Data de publicació:** 10/04/2015
Classificació: Article SCOPUS al Q2

- 7- Codi: 108187 Clau: Article (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2015 Autors: Adriano Santos; Fernanda C. Carvalho; Maria-Cristina Roque-Barreira; André Luiz Zorzetto-Fernandes; David Gimenez-Romero; Isidro Monzó; Paulo R. Bueno
Títol: Evidence for Conformational Mechanism on the Binding of TgMIC4 with β -Galactose-Containing Carbohydrate Ligand
Revista: 900850 - Langmuir
Informació addicional: Volum: 31 Número: Pàgina inicial: 12111 Pàgina final: 12119 Data de publicació: 21/10/2015
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 8- Codi: 103584 Clau: Article (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)
Any: 2015 Autors: Marta Martínez-Abadía; Shinto Varghese; Begoña Milián-Medina; Johannes Gierschner; Raquel Giménez; M. Blanca Rosa
Títol: Bent-core liquid crystalline cyanostilbenes: fluorescence switching and thermochromism
Revista: 910477 - Physical Chemistry Chemical Physics
Informació addicional: Volum: 17 Número: Pàgina inicial: 11715 Pàgina final: 11724 Data de publicació: 2015
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 9- Codi: 104494 Clau: Article (*PEREZ GIMENEZ, FACUNDO*)
Any: 2015 Autors: Stephen J. Barigye; Yovani Marrero-Ponce; Jure Zupan; Facundo Pérez-Giménez; Matheus P. Freitas
Títol: Structural and Physicochemical Interpretation of GT-STAF Information Theory-Based Indices
Revista: 900631 - Bulletin of the Chemical Society of Japan
Informació addicional: Volum: 88 Número: Pàgina inicial: 97 Pàgina final: 109 Data de publicació: 2015
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 10- Codi: 104495 Clau: Article (*PEREZ GIMENEZ, FACUNDO*)
Any: 2015 Autors: Oscar Martínez Santiago; Yovani Marrero-Ponce; Reisel Millán Cabrera; Stephen J. Barigye; Yoan Martínez-López; Luis M. Artiles Martínez; José O. Guerra de León; Facundo Perez-Giménez; Francisco Torrens
Títol: Extending Graph (Discrete) Derivative Descriptors to N-Tuple Atom-Relations
Revista: 910087 - Match-Communications in Mathematical and in Computer Chemistry
Informació addicional: Volum: 73 Número: 2 Pàgina inicial: 397 Pàgina final: 420 Data de publicació: 2015
Classificació: Article SCOPUS al Q1
-
- 11- Codi: 104496 Clau: Article (*PEREZ GIMENEZ, FACUNDO*)
Any: 2015 Autors: Gerardo M. Casañola-Martín; Huong Le-Thi-Thu; Facundo Pérez-Giménez; Yovani Marrero-Ponce; Matilde Merino-Sanjuán; Concepción Abad; Humberto González-Díaz
Títol: Multi-output model with Box-Jenkins operators of linear indices to predict multi-target inhibitors of ubiquitin-proteasome pathway
Revista: 909338 - Molecular Diversity
Informació addicional: Volum: 19 Número: Pàgina inicial: 347 Pàgina final: 356 Data de publicació: 2015
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 12- Codi: 112400 Clau: Article (*PEREZ GIMENEZ, FACUNDO*)
Any: 2015 Autors: Ricardo W. Pino Urias; Stephen J. Barigye; Yovani Marrero-Ponce; César R. García-Jacas; José R. Valdes-Martín; Facundo Perez-Gimenez
Títol: IMMAN: free software for information theory-based chemometric analysis
Revista: 909338 - Molecular Diversity
Informació addicional: Volum: 19 Número: Pàgina inicial: 305 Pàgina final: 319 Data de publicació: 2015
Classificació: Article ISI al 2on quartil
-

- 13- Codi: 100523 Clau: Article (*TEJERO TOQUERO, ROBERTO*)
 Any: 2015 Autors: Garcia-España, Enrique; Verdejo, Begona; Acosta-Rueda, Laura; Clares, M. Paz; Aguinaco, Almudena; Basallote, Manuel; Soriano, Conxa; Tejero, Roberto
 Títol: Equilibrium, Kinetic and Computational Studies on the Formation of Cu²⁺ and Zn²⁺ Complexes with an Indazole-Containing Azamacrocyclic Scorpionand: Evidence for Metal-Induced Tautomerism
 Revista: 900752 - Inorganic Chemistry
 Informació adicional: ID: ic-2014-029004. Volum: 54 Número: Pàgina inicial: 1983 Pàgina final: 1991 Data de publicació: 2015
 Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 14- Codi: 106873 Clau: Article (*TEJERO TOQUERO, ROBERTO*)
 Any: 2015 Autors: Tomothy J. Ragan; Rasmus Fogh; Roberto Tejero; Wim Vranken; Gaetano T. Montelione; Antonio Rosato; Geerten W Vuister
 Títol: Analysis of the structural quality of the CASD-NMR 2013 entries.
 Revista: 908599 - Journal of Biomolecular NMR
 Informació adicional: Volum: 62 Número: 4 Pàgina inicial: 527 Pàgina final: 540 Data de publicació: 03/06/2015
 Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 15- Codi: 110301 Clau: Article (*TEJERO TOQUERO, ROBERTO*)
 Any: 2015 Autors: Antonio Rosato, Wim Vranken, Rasmus H Fogh, Timothy J Ragan, Roberto Tejero, Kari Pederson, Hsiau-Wei Lee, James H Prestegard, Adelinda Yee, Bin Wu, Alexander Lemak, Scott Houliston, Cheryl H Arrowsmith ...
 Títol: The second round of Critical Assessment of Automated Structure Determination of Proteins by NMR: CASD-NMR-2013
 Revista: 908599 - Journal of Biomolecular NMR
 Informació adicional: Volum: 62 Número: 4 Pàgina inicial: 413 Pàgina final: 424 Data de publicació: 01/08/2015
 Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 16- Codi: 110302 Clau: Article (*TEJERO TOQUERO, ROBERTO*)
 Any: 2015 Autors: Gutmanas, Aleksandras; Adams, Paul D.; Bardiaux, Benjamin; Berman, Helen M.; Case, David A.; Fogh, Rasmus H.; Guentert, Peter; Hendrickx, Pieter M. S.; Herrmann, Torsten; Kleywegt, Gerard J.; Kobayashi ...
 Títol: NMR Exchange Format: a unified and open standard for representation of NMR restraint data.
 Revista: 913005 - Nature Structural & Molecular Biology
 Informació adicional: Volum: 22 Número: 6 Pàgina inicial: 433 Pàgina final: 434 Data de publicació: 01/06/2015
 Classificació: Altres
-
- 17- Codi: 110303 Clau: Article (*TEJERO TOQUERO, ROBERTO*)
 Any: 2015 Autors: Everett, John K.; Tejero, Roberto; Murthy, Sarath B. K.; Acton, Thomas B.; Aramini, James M.; Baran, Michael C.; Benach, Jordi; Cort, John R.; Eletsky, Alexander; Forouhar, Farhad; Guan, Rongjin ...
 Títol: A community resource of experimental data for NMR/X-ray crystal structure pairs
 Revista: 908379 - Protein Science
 Informació adicional: Volum: 25 Número: 1 Pàgina inicial: 30 Pàgina final: 45 Data de publicació: 01/10/2015
 Classificació: Article ISI al 2on quartil
-
- 18- Codi: 111804 Clau: Article (*TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
 Any: 2015 Autors: Katerzyna Swiderek, Iñaki Tuñón, Vicent Moliner, Joan Bertran
 Títol: Computational strategies for the design of new enzymatic functions
 Revista: 900228 - Archives of Biochemistry and Biophysics
 Informació adicional: Volum: 582 Número: Pàgina inicial: 68 Pàgina final: 79 Data de publicació: 19/03/2015
 Classificació: Article SCOPUS al Q1
-
- 19- Codi: 111805 Clau: Article (*TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
 Any: 2015 Autors: Iñaki Tuñón, Damien Laage, James T. Hynes
 Títol: Are there dynamical effects in enzyme catalysis? Some thoughts concerning the enzymatic chemical step
 Revista: 900228 - Archives of Biochemistry and Biophysics
 Informació adicional: Volum: 582 Número: Pàgina inicial: 42 Pàgina final: 55 Data de publicació: 15/06/2015
 Classificació: Article SCOPUS al Q1



-
- 20- Codi: 111806 Clau: Article (*TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2015 Autors: Katarzyna Swiderek, Iñaki Tuñón, Vicent Moliner, Joan Bertran
Títol: Protein flexibility and preorganization in the design of enzymes. The Kemp elimination catalyzed by HG3.17
Revista: 917096 - Acs Catalysis
Informació adicional: Volum: 5 Número: Pàgina inicial: 2587 Pàgina final: 2595 Data de publicació: 10/03/2015
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 21- Codi: 111807 Clau: Article (*TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2015 Autors: Katarzyna Swiderek, Iñaki Tuñón, Sergio Martf, Vicent Moliner
Títol: Protein conformational landscapes and catalysis. Influence of active site conformations in the reaction catalyzed by L-lactate dehydrogenase
Revista: 917096 - Acs Catalysis
Informació adicional: Volum: 5 Número: Pàgina inicial: 1172 Pàgina final: 1185 Data de publicació: 07/01/2015
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 22- Codi: 111808 Clau: Article (*TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2015 Autors: Louis Y. P. Luk, J. Javier Ruiz-Pernía, Aduragbemi S. Adesina, E. Joel Loveridge, Iñaki Tuñón, Vicent Moliner, Rudolf K. Allemann
Títol: Chemical ligation and isotope labeling to locate dynamic effects during catalysis by dihydrofolate reductase
Revista: 900624 - Angewandte Chemie-International Edition
Informació adicional: Volum: 54 Número: Pàgina inicial: 9016 Pàgina final: 9020 Data de publicació: 16/06/2015
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 23- Codi: 111809 Clau: Article (*TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2015 Autors: Katarzyna Swiderek, Iñaki Tuñón, Vicent Moliner, Juan Bertran
Títol: Peptide bond formation mechanism catalyzed by ribosome
Revista: 900665 - Journal of the American Chemical Society
Informació adicional: Volum: 137 Número: Pàgina inicial: 12024 Pàgina final: 12034 Data de publicació: 01/09/2015
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 24- Codi: 099382 Clau: Article (*TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; GARCIA MESEGUER, RAFAEL; ROCA MOLINER, MARIA TERESA; ZINOVJEVS, KIRILS*)
Any: 2015 Autors: Rafael García-Meseguer; Kirill Zinovjev; Maite Roca; J. Javier Ruiz-Pernía; 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: 882 Data de publicació: 2015
Classificació: Article SCOPUS al Q1
-
- 25- Codi: 103954 Clau: Article (*TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ROCA MOLINER, MARIA TERESA*)
Any: 2015 Autors: María Sánchez-Tarín; Katarzyna Swiderek; Maite Roca; and Iñaki Tuñón
Títol: Enzyme Promiscuity in Enolase Superfamily. A Theoretical Study of o-Succinylbenzoate Synthase Using QM/MM Methods
Revista: 909613 - Journal of Physical Chemistry B
Informació adicional: Volum: 119 Número: Pàgina inicial: 1899 Pàgina final: 1911 Data de publicació: 05/01/2015
Classificació: Article SCOPUS al Q1
-
- 26- Codi: 111334 Clau: Article (*TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ZINOVJEVS, KIRILS*)
Any: 2015 Autors: Kirill Zinovjev; Iñaki Tuñón
Títol: Transition state ensemble optimization for reactions of arbitrary complexity
Revista: 903314 - Journal of Chemical Physics
Informació adicional: Volum: 143 Número: Pàgina inicial: 13411-1 Pàgina final: 13411-15 Data de publicació: 06/10/2015
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-



-
- 27- **Codi:** 111810 **Clau:** Article (*TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ZINOVJEVS, KIRILS*)
Any: 2015 **Autors:** Rabindra Nath Manna, Kiril Zinovjev, Iñaki Tuñón, Agnieszka Dybala-Defratyka
Títol: Dehydrochlorination of hexachlorocyclohexanes catalyzed by the LinA dehydrohalogenase. A QM/MM study.
Revista: 909613 - Journal of Physical Chemistry B
Informació adicional: **Volum:** 119 **Número:** - **Pàgina inicial:** 15100 **Pàgina final:** 15109 **Data de publicació:** 11/11/2015
Classificació: Article SCOPUS al Q1
-
- 28- **Codi:** 100591 **Clau:** Article (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2015 **Autors:** J. Agrisuelas; C. Gabrielli; J.J. García-Jareño; H. Perrot; O. Sel; F. Vicente
Títol: Polymer dynamics in thin p-type conducting films investigated by ac-electrogravimetry. Kinetics aspects on anion exclusion, free solvent transfer, and conformational changes in poly(o-toluidine)
Revista: 901127 - Electrochimica Acta
Informació adicional: **Volum:** 153 **Número:** - **Pàgina inicial:** 33 **Pàgina final:** 43 **Data de publicació:** 2015
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 29- **Codi:** 102106 **Clau:** Article (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2015 **Autors:** J. Agrisuelas; C. Gabrielli; J.J. García-Jareño; H. Perrot; O. Sel; F. Vicente
Títol: Electrochemically induced free solvent transfer in thin poly(3,4-ethylenedioxythiophene) films
Revista: 901127 - Electrochimica Acta
Informació adicional: **Volum:** 164 **Número:** - **Pàgina inicial:** 21 **Pàgina final:** 30 **Data de publicació:** 2015
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 30- **Codi:** 106662 **Clau:** Article (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2015 **Autors:** J. Agrisuelas; J.J. García-Jareño; P. Rivas; J.M. Rodríguez-Mellado; F. Vicente
Títol: Electrochemistry and electrocatalysis of a Pt@poly(neutral red) hybrid nanocomposite
Revista: 901127 - Electrochimica Acta
Informació adicional: **Volum:** 171 **Número:** - **Pàgina inicial:** 165 **Pàgina final:** 175 **Data de publicació:** 20/07/2015
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 31- **Codi:** 106663 **Clau:** Article (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2015 **Autors:** R. Catalán; J. Agrisuelas; A. Cuenca; J.J. García-Jareño; A.F. Roig; F. Vicente
Títol: Interfacial Role of Cesium in Prussian Blue Films
Revista: 901131 - Journal of the Electrochemical Society
Informació adicional: **Volum:** 162 **Número:** 9 **Pàgina inicial:** H727 **Pàgina final:** H733 **Data de publicació:** 09/07/2015
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 32- **Codi:** 106664 **Clau:** Article (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2015 **Autors:** J. Agrisuelas; C. Delgado; C. Gabrielli; J. J. García-Jareño; H. Perrot; O. Sel; F. Vicente
Títol: The role of NH₄⁺ cations on the electrochemistry of Prussian Blue studied by electrochemical, mass, and color impedance spectroscopy
Revista: 910049 - Journal of Solid State Electrochemistry
Informació adicional: **Volum:** 19 **Número:** - **Pàgina inicial:** 2555 **Pàgina final:** 2564 **Data de publicació:** 05/03/2015
Classificació: Article SCOPUS al Q1
-



-
- 33- Codi: 108578 Clau: Article (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2015 Autors: Alejandro Cuenca; Jerónimo Agrisuelas; Raquel Catalán; José J. García-Jareño; Francisco Vicente
Títol: Motional Resistance Evaluation of the Quartz Crystal Microbalance to Study the Formation of a Passive Layer in the Interfacial Region of a Copper/Diluted Sulfuric Solution.
Revista: 900850 - Langmuir
Informació adicional: Volum: 31 Número: 35 Pàgina inicial: 9655 Pàgina final: 9664 Data de publicació: 19/08/2015
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 34- Codi: 108579 Clau: Article (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; AGRISUELAS VALLES, JERONIMO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2015 Autors: Alejandro Cuenca; Jerónimo Agrisuelas; José J. García-Jareño; Francisco Vicente
Títol: Oscillatory changes of the heterogeneous reactive layer detected with the motional resistance during the galvanostatic deposition of copper in sulfuric solution
Revista: 900850 - Langmuir
Informació adicional: Langmuir 2015 Nov 13;31(46):12664-73. Epub 2015 Nov 13. Volum: 31 Número: 46 Pàgina inicial: 12664 Pàgina final: 12673 Data de publicació: 13/11/2015
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-
- 35- Codi: 109282 Clau: Article (*VICENTE PEDROS, FRANCISCO; GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2015 Autors: J. Agrisuelas; C. Gabrielli; J.J. García-Jareño; H. Perrot; O. Sel; F. Vicente
Títol: Viscoelastic potential-induced changes in acoustically thin films explored by quartz crystal microbalance with motional resistance monitoring Original
Revista: 901127 - Electrochimica Acta
Informació adicional: Volum: 176 Número: Pàgina inicial: 1454 Pàgina final: 1463 Data de publicació: 10/09/2015
Classificació: Article ISI al 1er quartil
-



Capítols de Llibres i altres publicacions

- 1- **Codi:** 067882 **Clau:** Capítol de llibre (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2014 **Títol:** Dual polarization interferometry. a technique to light up the nanomolecular world
Autors: Jorge Escorihuela, Miguel A. González-Martínez, José L. López-Paz, Rosa Puchades, Ángel Maquieira, David Giménez-Romero
Llibre: VIII International Workshop on Sensors and Molecular
ISBN: 978-84-697-1302-0
Classificació: Capítol de llibre
-
- 2- **Codi:** 067883 **Clau:** Capítol de llibre (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2014 **Títol:** Monomerization strategies for purification of anti-ro 52 polyclonal antibodies
Autors: Noelle M. Nascimento, Sergi Morais, Rosa Puchades, Ángel Maquieira, David Gimenez-Romero
Llibre: VIII International Workshop on Sensors and Molecular
ISBN: 978-84-697-1302-0
Classificació: Capítol de llibre
-
- 3- **Codi:** 067884 **Clau:** Capítol de llibre (*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, Ángel Maquieira
Llibre: VIII International Workshop on Sensors and Molecular
ISBN: 978-84-697-1302-0
Classificació: Capítol de llibre
-
- 4- **Codi:** 067885 **Clau:** Capítol de llibre (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2015 **Títol:** Microanálisis masivo de fármacos basado en técnicas cinéticas
Autors: G. Sancho-Fornes, Ernest Peris, David Gimenez-Romero, Sergi Morais, Rosa Puchades y Ángel Maquieira
Llibre: IX International Workshop on Sensors and Molecular
ISBN: 978-84-608-2360-5
Classificació: Capítol de llibre
-
- 5- **Codi:** 067886 **Clau:** Capítol de llibre (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2015 **Títol:** Biosensing Autoantibodies for the Diagnosis of Systemis Lupus Erythematosus
Autors: N.M. Nascimento, S. Morais, J. Escorihuela, R. Puchades, A. Maquieira y D. Gimenez-Romero
Llibre: IX International Workshop on Sensors and Molecular
ISBN: 978-84-608-2360-5
Classificació: Capítol de llibre
-
- 6- **Codi:** 067887 **Clau:** Capítol de llibre (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2015 **Títol:** Characterization of IgG aggregates by Dual Polarization Interferometry
Autors: Alba Rubert, Jose Luis López-Paz, Miguel Ángel González-Martínez, David Giménez-Romero, Rosa Puchades y Ángel Maquieira.
Llibre: IX International Workshop on Sensors and Molecular
ISBN: 978-84-608-2360-5
Classificació: Capítol de llibre
-
- 7- **Codi:** 067888 **Clau:** Capítol de llibre (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2015 **Títol:** Predicting the idiotype IgG-Ro52 molecular recognition in lupic patients
Autors: N.M. Nascimento, D. Giménez-Romero, I.S. Monzó, R. Tejero, S. Morais, R. Puchades y A. Maquieira
Llibre: IX International Workshop on Sensors and Molecular
ISBN: 978-84-608-2360-5
Classificació: Capítol de llibre



- 8- Codi: 068473 Clau: Capítol de llibre (*TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO*)
Any: 2015 Títol: Exploring chemical reactivity in enzyme catalyzed processes using QM/MM methods. An application to dihydrofolate reductase
Autors: J. Javier Ruiz-Pernía, Vicent Moliner, Iñaki Tuñón
Llibre: Quantum modeling of complex molecular systems. Challenges and advances in computational chemistry and physics 21
ISBN: 978-3-319-21625-6
Classificació: Capítol en editorial d'excel·lència
-



Participació en Congressos i Reunions Científiques

- 1- **Codi:** 129955 **Tipus de participació:** Comunicació (*GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2015 **Títol:** Impedancia bajo condiciones aparentemente no estacionarias
Autors: J. Agrisuelas; J.J. García Jareño; F. Vicente
Caràcter: Nacional
Congrés: XXXVI REUNION DEL GRUPO DE ELECTROQUÍMICA DE LA REAL SOCIEDAD ESPAÑOLA DE QUÍMICA. XVII ENCONTRO IBÉRICO DE ELECTROQUÍMICA.
Publicació: Libro de resúmenes del congreso
Classificació: Comunicació a Congrés Nacional

- 2- **Codi:** 129956 **Tipus de participació:** Comunicació (*GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2015 **Títol:** Deconvolución de voltamperogramas de Poli (Azure A)
Autors: J. Agrisuelas; R. Catalán; A. Cuenca; J.J. García Jareño; R. Sanchis; F. Vicente
Caràcter: Nacional
Congrés: XXXVI REUNION DEL GRUPO DE ELECTROQUÍMICA DE LA REAL SOCIEDAD ESPAÑOLA DE QUÍMICA. XVII ENCONTRO IBÉRICO DE ELECTROQUÍMICA.
Publicació: Libro de resúmenes del congreso
Classificació: Comunicació a Congrés Nacional

- 3- **Codi:** 129957 **Tipus de participació:** Comunicació (*GARCIA JAREÑO, JOSE JUAN*)
Any: 2015 **Títol:** Sobre la electrogeneración de Poly (roj neutro)
Autors: D. Ferrús, J. Agrisuelas; J.J. García Jareño; O. Vila; F. Vicente
Caràcter: Nacional
Congrés: XXXVI REUNION DEL GRUPO DE ELECTROQUÍMICA DE LA REAL SOCIEDAD ESPAÑOLA DE QUÍMICA. XVII ENCONTRO IBÉRICO DE ELECTROQUÍMICA.
Publicació: Libro de resúmenes del congreso
Classificació: Comunicació a Congrés Nacional

- 4- **Codi:** 136072 **Tipus de participació:** Ponència invitada (*GARCIA LOPERA, ROSA*)
Any: 2015 **Títol:** Zapeando en clase: ¿es posible aprender y divertirse con un click?
Autors: R. García Lopera; L.E. Ochando Gómez; R. Pou Américo
Caràcter: Nacional
Congrés: Jornadas sobre Sistemas de Votación Electrónica en la Docencia Universitaria (JSVE)
Publicació: http://mmedia.uv.es/html5/g/cream//43060_rosa_garcia.mp4
Classificació: Ponència Invitada àmbit Nacional

- 5- **Codi:** 131941 **Tipus de participació:** Ponència (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2015 **Títol:** Biosensing Autoantibodies for the Diagnosis of Systemic Lupus Erythematosus
Autors: N. M. Nascimento¹, S. Morais¹, J. Escorihuela², R. Puchades¹, A. Maquieira¹ and D. Gimenez-Romero
Caràcter: Internacional
Congrés: IX International Workshop on Sensors and Molecular Recognition
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacional

- 6- **Codi:** 131942 **Tipus de participació:** Ponència (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2015 **Títol:** Micranálisis masivo de fármacos basado en técnicas cinéticas
Autors: Gabriel Sancho-Fornes, Ernest Peris, David Giemenz-Romero, Sergi Morais, Rosa Puchades and Angel Maquieira
Caràcter: Internacional
Congrés: IX International Workshop on Sensors and Molecular Recognition
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacional



-
- 7- **Codi:** 135988 **Tipus de participació:** Poster (*GIMENEZ ROMERO, DAVID*)
Any: 2015 **Títol:** Characterization of IgG aggregates by Dual Polarization Interferometry
Autors: Rubert Alba, López-Paz Jose Luis, González-Martínez Miguel Ángel, Giménez-Romero David, Puchades Rosa, Maquieira Ángel
Caràcter: Internacional
Congrés: IX International Workshop on Sensors and Molecular Recognition
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 8- **Codi:** 124616 **Tipus de participació:** Comunicació (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)
Any: 2015 **Títol:** MO and Excited State Design of Low Bandgap Copolymers
Autors: B. Milián-Medina; J. Gierschner
Caràcter: Internacional
Congrés: 6th European Symposium on Computing pi-Conjugated Compounds
Publicació:
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional
-
- 9- **Codi:** 139128 **Tipus de participació:** Ponència (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)
Any: 2015 **Títol:** Excited State Features and Dynamics in Conjugated Organic Materials
Autors: J. Gierschner, B. Milián-Medina, M. Wykes, S. Bhattacharyya, S. Varghese, J. Shi, R. Parambil, B. Dähnekamp, J. Moreno
Caràcter: Internacional
Congrés: 6th Symposium on Computing pi-Conjugated Compounds
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacional
-
- 10- **Codi:** 139129 **Tipus de participació:** Poster (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)
Any: 2015 **Títol:** Solid State Luminescent Enhancement in Dicyano-Distyrylbenzenes: Intra- and Intermolecular Contributions
Autors: J. Shi, S. -J. Yoon, S. K. Park, S. Y. Park, S. Varghese, B. Milián-Medina, J. Gierschner
Caràcter: Internacional
Congrés: 6th Symposium on Computing pi-Conjugated Compounds
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 11- **Codi:** 139130 **Tipus de participació:** Poster (*MILIAN MEDINA, BEGOÑA*)
Any: 2015 **Títol:** Small Substituent - Strong Effect : Impact of Fluorination on the Photophysics in Ladder-Type Quaterphenyl
Autors: B. Dähnekamp, B. Kobin, S. Bhattacharyya, B. Milián-Medina, S. Hecht and J. Gierschner
Caràcter: Internacional
Congrés: ISNA 16: 16th International Symposium on Novel Aromatic Compounds
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 12- **Codi:** 134994 **Tipus de participació:** Comunicació (*MONZO MANSANET, ISIDRO*)
Any: 2015 **Títol:** Predicting the idiotype IgG-Ro52 molecular recognition in lupic patients.
Autors: N.M. Nascimento, D. Giménez-Romero, I.S. Monzó, R. Tejero, S. Morais, E. Puchades and A. Maquieira.
Caràcter: Internacional
Congrés: IX International Workshop on sensors and molecular recognition.
Publicació: ISBN: 978-84-608-2360-5
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional
-



- 13- Codi: 134435 Tipus de participació: Ponència invitada (ROCA MOLINER, MARIA TERESA)
Any: 2015 Títol: Unraveling the Reaction Mechanism of Enzymatic Methylation of DNA
Autors: M. Roca
Caràcter: Internacional
Congrés: Warshel Symposium: Multiscale Modeling of Complex Molecules & Life Processes
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada àmbit Internacional
-
- 14- Codi: 133693 Tipus de participació: Comunicació (TEJERO TOQUERO, ROBERTO)
Any: 2015 Títol: Estudios de dinámica molecular sobre errores de DNA
Autors: Alvar Martínez-Camarena, Aida Nebot, Roberto Tejero, Jose M. Llinares, E. García-España
Caràcter: Nacional
Congrés: XVI Escuela Nacional de Materiales Moleculares XV Escuela Nacional de Materiales Moleculares
Publicació:
Classificació: Comunicació a Congrés Nacional
-
- 15- Codi: 134633 Tipus de participació: Comunicació (TEJERO TOQUERO, ROBERTO)
Any: 2015 Títol: Mismatch targeting with azascorpiand ligands
Autors: Àlvar Martínez-Camarena, Aida Nebot, Jorge González, M. Paz Clares, Roberto Tejero, Enrique García-España
Caràcter: Nacional
Congrés: V Jornadas Científicas Consolider CSD2010-00065. Granada 2015
Publicació:
Classificació: Comunicació a Congrés Nacional
-
- 16- Codi: 134650 Tipus de participació: Comunicació (TEJERO TOQUERO, ROBERTO)
Any: 2015 Títol: Mismatch targeting with aza-scorpianid ligands
Autors: Alvar Martínez-Camarena, Aida Nebot, Jorge Gonzalez, M. Paz Clares, Roberto Tejero, Jose M. Llinares, E. García-España
Caràcter: Internacional
Congrés: 8th European School on Molecular Nanoscience. Paris 2015
Publicació:
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional
-
- 17- Codi: 137363 Tipus de participació: Ponència invitada (TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO)
Any: 2015 Títol: Adiabatic and Nonadiabatic hydride transfer in formate dehydrogenase
Autors: Iñaki Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: Isotopes 2015
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada àmbit Internacional
-
- 18- Codi: 137365 Tipus de participació: Ponència invitada (TUÑÓN GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO)
Any: 2015 Títol: Simulations of complex chemical reactions. The case of the enzymatic C5-methylation of DNA
Autors: Iñaki Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: DNA damages: modeling and rationalize structure and reactivity. CECAM Workshop.
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada àmbit Internacional



-
- 19- **Codi:** 137367 **Tipus de participació:** Ponència invitada (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO)
Any: 2015 **Títol:** Theoretical description of Enzymatic hydride transfers. A theoretical analysis of formate dehydrogenase
Autors: Iñaki Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: Spain-Japan Symposium on Theoretical and Computational Chemistry of complex systems
Publicació:
Classificació: Ponència Invitada àmbit Internacional
-
- 20- **Codi:** 132454 **Tipus de participació:** Ponència (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ARANDA MORATALLA, JUAN)
Any: 2015 **Títol:** Dynamics and reactivity of DNA Methyltransferase Enzymes studied by QMMM and MD simulations
Autors: Juan Aranda
Caràcter: Nacional
Congrés: XXXV Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Nacional
-
- 21- **Codi:** 132088 **Tipus de participació:** Comunicació (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; GARCIA MESEGUER, RAFAEL)
Any: 2015 **Títol:** Theoretical description of enzymatic hydride transfer. The formate dehydrogenase case(FDH)
Autors: Rafael García-Meseguer, Damien Laage, James T. Hynes, Iñaki Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: 4th Worskshop TCCM
Publicació:
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional
-
- 22- **Codi:** 137364 **Tipus de participació:** Ponència (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; GARCIA MESEGUER, RAFAEL)
Any: 2015 **Títol:** On the nature of the hydride transfer step in formate dehydrogenase. A QM/MM study
Autors: Iñaki Tuñón, Rafael García-Meseguer, Damien Laage, James T. Hynes
Caràcter: Internacional
Congrés: 7th International Theoretical Biophysics Symposium
Publicació:
Classificació: Ponència a Congrés Internacional
-
- 23- **Codi:** 133444 **Tipus de participació:** Poster (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; GARCIA MESEGUER, RAFAEL; ZINOVJEVS, KIRILS)
Any: 2015 **Títol:** The Role of protein structure, flexibility and dynamics in enzymatic catalysis
Autors: Rafael García Meseguer; Kiril Zinovjcv; J. Javier Ruiz Pernía; Maite Roca; Iñaki Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: 7th International Theoretical Biophysics Simposium (Theobio)
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 24- **Codi:** 134433 **Tipus de participació:** Comunicació (TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ROCA MOLINER, MARIA TERESA)
Any: 2015 **Títol:** On the Role of Dynamic Motions in Human Purine Nucleoside Phosphorylase Catalysis
Autors: M. Roca; V. Moliner, I. Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: 7th International Theoretical Biophysics Symposium. TheoBio 2015
Publicació:
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional
-

- 25- Codi: 124094 Tipus de participació: Poster (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ZINOVJEVS , KIRILS*)
Any: 2015 Títol: Localization of transition state ensembles for reactions of arbitrary complexity
Autors: Kirill Zinovjev; Iñaki Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: Computing free energy across disciplines: from method development to applications
Publicació:
Classificació: Pòster a Congrés Internacional
-
- 26- Codi: 136563 Tipus de participació: Comunicació (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ZINOVJEVS , KIRILS*)
Any: 2015 Títol: Transition state ensembles and role of protein motions in enzymatic reactions
Autors: Kirill Zinovjev; Iñaki Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: 4th Workshop TCCM
Publicació:
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional
-
- 27- Codi: 136564 Tipus de participació: Comunicació (*TUÑON GARCIA DE VICUÑA, IGNACIO NILO; ZINOVJEVS , KIRILS*)
Any: 2015 Títol: Climbing the enzymatic hill. Transition state ensembles and role of protein motions.
Autors: Kirill Zinovjev, Iñaki Tuñón
Caràcter: Internacional
Congrés: 7th International Theoretical Biophysics Simposium (Theobio)
Publicació:
Classificació: Comunicació a Congrés Internacional
-

