

**TESIS DEFENDIDAS EN EL PROGRAMA DE DOCTORADO EN QUÍMICA MÉDICA (D424)  
EN 2018 Y PUBLICACIONES DERIVADAS DE LAS TESIS**

Doctorando	Carlos Roca Magadán
Tesis	Estrategias Computacionales en el Desarrollo de Neurofármacos: Una Tecnología de Éxito
Director/es	Ana Martínez / Nuria Campillo
Universidad	Universidad Complutense
Fecha lectura	26/10/2018
Calificación	Sobresaliente <i>cum laude</i>
Mención Internacional	No

**1)** V. Sebastián-Pérez, C. Roca, M. Awale, J. L. Reymond, A. Martínez, C. Gil, N. E. Campillo "Medicinal and Biological Chemistry (MBC) Library: An Efficient Source of New Hits" *J. Chem. Inf. Model.* **2017**, *57*, 2143–2151.  
Calidad publicación: Índice de impacto: 3.804 (JCR 2017) Q1: Si

**2)** I. Ponzoni, V. Sebastián-Pérez, C. Requena-Triguero, C. Roca, M. J. Martínez, F. Cravero, M. F. Díaz, J. A. Páez, R. G. Arrayás, J. Adrio, N. E. Campillo "Hybridizing Feature Selection and Feature Learning Approaches in QSAR Modeling for Drug Discovery" *Sci. Rep.* **2017**, *7*, 2403.  
Calidad publicación: Índice de impacto: 4.122 (JCR 2017) Q1: Si

**3)** V. Palomo, D. I. Pérez, C. Roca, C. Anderson, N. Rodríguez-Muela, C. Pérez, J. A. Morales-Garcia, J. A. Reyes, N. E. Campillo, A. M. Pérez-Castillo, L. L. Rubin, L. Timchenko, C. Gil, A. Martínez "Subtly Modulating Glycogen Synthase Kinase 3 $\beta$ : Allosteric Inhibitor Development and Their Potential for the Treatment of Chronic Diseases" *J. Med. Chem.* **2017**, *60*, 4983–5001.  
Calidad publicación: Índice de impacto: 6.253 (JCR 2017) Q1: Si

**4)** T. P. C. Chierrito, S. Pedersoli-Mantoani, C. Roca, C. Requena, V. Sebastián-Pérez, W. O. Castillo, N. C. S. Moreira, C. Pérez, E. T. Sakamoto-Hojo, C. S. Takahashi, J. Jiménez-Barbero, F. J. Cañada, N. E. Campillo, A. Martínez, I. Carvalho "From Dual Binding Site Acetylcholinesterase Inhibitors to Allosteric Modulators: A New Avenue for Disease-Modifying Drugs in Alzheimer's Disease" *Eur. J. Med. Chem.* **2017**, *139*, 773–791.  
Calidad publicación: Índice de impacto: 4.816 (JCR 2017) Q1: Si

**5)** C. Roca, L. Martínez-González, M. Daniel-Mozo, J. Sastre, L. Infantes, A. Mansilla, A. Chaves-Sanjuan, J. M. González-Rubio, C. Gil, H. F. J. Cañada, A. Martínez, M. J. Sánchez-Barrena, N. E. Campillo "Deciphering the Inhibition of the Neuronal Calcium Sensor 1 and the Guanine Exchange Factor Ric8a with a Small Phenothiazine Molecule for the Rational Generation of Therapeutic Synapse Function Regulators" *J. Med. Chem.* **2018**, *61*, 5910–5921.  
Calidad publicación: Índice de impacto: 6.253 (JCR 2017) Q1: Si

**6)** A. Gandini, M. Bartolini, D. Tedesco, L. Martínez-González, C. Roca, N. E. Campillo, J. Zaldivar-Díez, C. Pérez, G. Zuccheri, A. Miti, A. feoli, S. Castellano, S. Petralla, B. Monti, M. Rossi, F. Moda, G. Legname, A. Martínez, M. L. Bolognesi "Tau-Centric Multitarget Approach for Alzheimer's Disease: Development of First-in-Class Dual Glycogen Synthase Kinase 3 beta and Tau-Aggregation Inhibitors" *J. Med. Chem.* **2018**, *61*, 7640–7656.  
Calidad publicación: Índice de impacto: 6.253 (JCR 2017) Q1: Si

**7)** T. P. C. Chierrito, S. Pedersoli-Mantoani, C. Roca, V. Sebastián-Pérez, L. Martínez-González, D. I. Pérez, A. Canales, H. F. J. Cañada, N. E. Campillo, I. Carvalho, A. Martínez "Chameleon-Like Behavior of Indolylpiperidines in Complex with Cholinesterase Targets: Potent Butyrylcholinesterase Inhibitors" *Eur. J. Med. Chem.* **2018**, *145*, 431–444.

Calidad publicación: Índice de impacto: 4.816 (JCR 2017) Q1: Si

**8)** C. Roca, C. Requena, V. Sebastián-Pérez, S. Malhotra, C. Radoux, C. Pérez, A. Martínez, J. A. Páez A. T. L. Blundell, N. E. Campillo "Identification of New Allosteric Sites and Modulators of AChE Through Computational and Experimental Tools" *J. Enzyme Inhib. Med. Chem.* **2018**, *33*, 1034–1047.

Calidad publicación: Índice de impacto: 3.638 (JCR 2017) Q1: Si

**9)** P. de Andrade, S. P. Mantoani, P. S. Gonçalves Nunes, C. Roca, C. Pérez, D. J. Xavier, E. T. Sakamoto Hojo, N. E. Campillo, A. Martínez, I. Carvalho "Highly Potent and Selective Aryl-1,2,3-triazolyl Benzylpiperidine Inhibitors Toward Butyrylcholinesterase in Alzheimer's Disease" *Bior. Med. Chem.* **2019**, doi: 10.1016/j.bmc.2018.12.030.

Calidad publicación: Índice de impacto: 2.881 (JCR 2017) Q1: No

Doctorando	Pedro Emilio Bosch Mendoza
Tesis	Nuevos Fluoróforos Catiónicos Intercalantes de ADN como Potenciales Sondas para esta Biomolécula
Director/es	Juan J. Vaquero López / David Sucunza Sáenz
Universidad	Universidad de Alcalá
Fecha lectura	14/12/2018
Calificación	Sobresaliente <i>cum laude</i>
Mención Internacional	No

**1)** R. M. Suárez, P. Bosch, D. Sucunza, A. M. Cuadro, A. Domingo, F. Mendicuti, J. J. Vaquero "Targeting DNA with Small Molecules: A Comparative Study of a Library of Azonia Aromatic Chromophores" *Org. Biomol. Chem.* **2015**, *13*, 527–538.

Calidad publicación: Índice de impacto: 3.423 (JCR 2017) Q1: No

**2)** P. Bosch, V. García, B. S: Bilen, D. Sucunza, A. Domingo, F. Mendicuti, J. J. Vaquero "Imidazopyridinium Cations: A New Family of Azonia Aromatic Heterocycles with Applications as DNA Intercalators" *Dyes Pigm.* **2017**, *138*, 135–146.

Calidad publicación: Índice de impacto: 3.767 (JCR 2017) Q1: Si

**3)** P. Bosch, V. García, B. S: Bilen, D. Sucunza, A. Domingo, F. Mendicuti, J. J. Vaquero "Dibenzopyridoimidazocinnolinium Cations: A New Family of Light-up Fluorescent DNA Probes" *Org. Chem. Front.* **2018**, *5*, 1916–1927.

Calidad publicación: Índice de impacto: 5.455 (JCR 2017) Q1: Si

Doctorando	Jean-Marc Billod
Tesis	Modulación Del Tlr4: Estudios de Reconocimiento Molecular y Diseño de Fármacos por Modelado Molecular
Director/es	Sonsoles Martín Santamaría
Universidad	Universidad Complutense
Fecha lectura	04/05/2018
Calificación	Sobresaliente <i>cum laude</i>
Mención Internacional	Si

**1)** J.-M. Billod, A. Lacetera, J. Guzmán-Caldentey, S. Martín-Santamaría “Computational Approaches to Toll-Like Receptor 4 Modulation” *Molecules* **2016**, *21*, E994.

Calidad publicación: Índice de impacto: 3.098 (JCR 2017) Q1: No

**2)** S. Sestito, F. Facchini, I. Morbioli, J.-M. Billod, S. Martín-Santamaría, A. Casnati, F. Sansone, F. Peri “Amphiphilic Guanidinocalixarenes Inhibit Lipopolysaccharide (LPS)- and Lectin-Stimulated Toll-like Receptor 4 (TLR4) Signaling” *J. Med. Chem.* **2017**, *60*, 4882–5892.

Calidad publicación: Índice de impacto: 6.253 (JCR 2017) Q1: Si

**3)** F. DiLorenzo, J.-M. Billod, S. Martín-Santamaría, A. Silipo, A. Molinaro “Gram-Negative Extremophile Lipopolysaccharides: Promising Source of Inspiration for a New Generation of Endotoxin Antagonists” *Eur. J. Org. Chem.* **2017**, *28*, 4055–4073.

Calidad publicación: Índice de impacto: 2.882 (JCR 2017) Q1: No

**4)** F. A. Facchini, L. Zaffaroni, A. Minotti, S. Rapisarda, V. Calabrese, M. Forcella, P. Fusi, C. Airoidi, C. Ciaramelli, J.-M. Billod, A. B. Schromm, H. Braun, C. Palmer, R. Beyaert, F. Lapenta, R. Jerala, G. Pirianov, S. Martín-Santamaría, F. Peri “Structure-Activity Relationship in Monosaccharide-Based Toll-Like Receptor 4 (TLR4) Antagonists” *J. Med. Chem.* **2018**, *61*, 2895–2909.

Calidad publicación: Índice de impacto: 6.253 (JCR 2017) Q1: Si

**5)** L. Lembo-Fazio, J.-M. Billod, F. Di Lorenzo, I. Paciello., M. Pallach, S. Vaz-Francisco, A. Holgado, R. Beyaert, M. Fresno, A. Shimoyama, R. Lanzetta, K. Fukase, D. Gully, E. Giraud, S. Martín-Santamaría, M.-L. Bernardini, A. Silipo “Bradyrhizobium Lipid A: Immunological Properties and Molecular Basis of Its Binding to the Myeloid Differentiation Protein-2/Toll-Like Receptor 4 Complex” *Front. Immunol.* **2018**, *9*, 1888.

Calidad publicación: Índice de impacto: 5.511 (JCR 2017) Q1: Si

**6)** S. Entova, J.-M. Billod, J.-M. Swiecicki, S. Martín-Santamaría, B. Imperiali “Insights into the Key Determinants of Membrane Protein Topology Enable the Identification of New Monotopic Folds” *eLife* **2018**, *7*, e40889.

Calidad publicación: Índice de impacto: 7.616 (JCR 2017) Q1: Si