

**TESIS DEFENDIDAS EN EL PROGRAMA DE DOCTORADO EN QUÍMICA MÉDICA (D424)
EN 2017 Y PUBLICACIONES DERIVADAS DE LAS TESIS**

Doctorando	Lucía Pérez Regidor
Tesis	Computational Studies of Toll-like Receptor 4
Director/es	Sonsoles Martín Santamaría
Universidad	Universidad Complutense
Fecha lectura	11/10/2017
Calificación	Sobresaliente <i>cum laude</i>
Mención Internacional	Si
<p>1) J. Klett, J. Reeves, N. Oberhauser, L. Pérez-Regidor, S. Martín-Santamaría “Modulation of Toll-like Receptor 4. Insights from X-ray Crystallography and Molecular Modeling” <i>Curr. Top. Med. Chem.</i> 2014, <i>14</i>, 2672–2683. Calidad publicación: Índice de impacto: 3.374 (JCR 2017) Q1: No</p> <p>2) L. Pérez-Regidor, M. Zariroh, L. Ortega, S. Martín-Santamaría “Virtual Screening Approaches Towards the Discovery of Toll-like Receptor Modulators” <i>Int. J. Mol. Sci.</i> 2016, <i>17</i>, E1508. Calidad publicación: Índice de impacto: 3.687 (JCR 2017) Q1: No</p> <p>3) C. Ciaramelli, V. Calabrese, S. E. Sestito, L. Pérez-Regidor, J. Klett, A. Oblak, R. Jerala, M. Piazza, S. Martín-Santamaría, F. Peri “Glycolipid-based TLR4 Modulators and Fluorescent Probes: Rational Design, Synthesis, and Biological Properties” <i>Chem. Biol. Drug. Des.</i> 2016, <i>88</i>, 217–229. Calidad publicación: Índice de impacto: 2.328 (JCR 2017) Q1: No</p> <p>4) J. Moleres, A. Fernández-Calvet, R. L. Ehrlich, S. Martí, L. Pérez-Regidor, B. Euba, I. Rodríguez-Arce, S. Balashov, E. Cuevas, J. Linares, C. Ardanuy, S. Martín-Santamaría, G. D. Ehrlich, J. C. Mell, J. Garmendia “Antagonistic Pleiotropy in the Bifunctional Surface Protein fadl (ompp1) during Adaptation of Haemophilus Influenzae to Chronic Lung Infection Associated with Chronic Obstructive Pulmonary Disease” <i>MBio.</i> 2018, <i>9</i>, e01176–18 Calidad publicación: Índice de impacto: 6.689 (JCR 2017) Q1: Si</p>	

Doctorando	María Teresa Gómez Ochoa
Tesis	Obtención, Caracterización y Evaluación de Nitroderivados de Heparina y Heparinas de Bajo Peso Molecular para el Tratamiento de Úlceras
Director/es	Guillermo Franco Rodríguez
Universidad	Universidad Complutense
Fecha lectura	10/07/2017
Calificación	Sobresaliente <i>cum laude</i>
Mención Internacional	No
<p>M. T. Gómez Ochoa, G. Franco Rodríguez “Procedimiento de Preparación de Derivados de Glicosaminoglicanos Donadores de Óxido Nítrico, Nitroderivados Obtenidos y su Uso en Tratamiento de Úlceras Crónicas. Patente española Nº ES2357601A1 y Patente Internacional Nº WO2012101310A1.</p>	

Doctorando	Jose Luis Moraleda Navamuel
Tesis	Estudio Comparativo de Heparinas de Bajo Peso Molecular, Secuenciación de Sus Cadenas Oligosacarídicas
Director/es	Guillermo Franco Rodríguez / Carolina Burgos García
Universidad	Universidad de Alcalá
Fecha lectura	14/07/2017
Calificación	Sobresaliente
Mención Internacional	No
Tesis Industrial sin publicaciones	

Doctorando	Alessandra Lacetera
Tesis	Estudios Computacionales de Interacciones Carbohidrato-Proteína
Director/es	Sonsoles Martín Santamaría
Universidad	Universidad Complutense
Fecha lectura	16/06/2017
Calificación	Sobresaliente <i>cum laude</i>
Mención Internacional	Si
<p>1) J.-M. Billod, A. Lacetera, J. Guzmán-Caldentey, S. Martín-Santamaría “Computational Approaches to Toll-Like Receptor 4 Modulation” <i>Molecules</i> 2016, <i>21</i>, E994. Calidad publicación: Índice de impacto: 3.098 (JCR 2017) Q1: No</p> <p>2) P. Carpintero-Fernández, R. Gago-Fuentes, A. Lacetera, M. Varela-Eirin, B. Acea, E. Fonseca, S. Martín-Santamaría, M. D. Mayan “Targeting Sialic Acid-Modified Receptors as a Potential Therapy for Osteoarthritis” <i>Osteoporos. Int.</i> 2016, <i>24</i>, S334. Calidad publicación: Índice de impacto: 3.857 (JCR 2017) Q1: No</p> <p>3) M. Ghirardello, M. de las Rivas, A. Lacetera, I. Delso, E. Lira-Navarrete, T. Tejero, S. Martín-Santamaría, R. Hurtado-Guerrero, P. Merino “Glycomimetics Targeting Glycosyltransferases: Synthetic, Computational and Structural Studies of Less-polar Conjugates” <i>Chem. Eur. J.</i> 2016, <i>22</i>, 7215–7224. Calidad publicación: Índice de impacto: 5.16 (JCR 2017) Q1: Si</p>	

Doctorando	Giulia Bianchini
Tesis	Desarrollo y Aplicaciones de la Reacción de Povarov Aza-Viníloga de Alfa-Cetoiminas
Director/es	José Carlos Menéndez / María Teresa Ramos
Universidad	Universidad Complutense
Fecha lectura	24/02/2017
Calificación	Sobresaliente <i>cum laude</i>
Mención Internacional	Si
<p>1) V. González-Ruiz, I. Pascua, T. Fernández-Marcelo, P. Ribelles, G. Bianchini, V. Sridharan, P. Iniesta, M. T. Ramos, A. I. Olives, M. A. Martín, J. C. Menéndez “B-Ring-aryl Substituted Luotonin A Analogues with a New Binding Mode to the Topoisomerase 1-DNA Complex Show Enhanced Cytotoxic Activity” <i>PLOS One</i>, 2014, <i>9</i>, e95998. Calidad publicación: Índice de impacto: 2.766 (JCR 2017) Q1: Si</p>	

2) G. Bianchini, P. Ribelles, D. Becerra, M. T. Ramos, J. C. Menéndez “Efficient Synthesis of 2-Acylquinolines Based on an Aza-vinylogous Povarov Reaction” *Org. Chem. Front.* **2016**, *3*, 412–422.
Calidad publicación: Índice de impacto: 5.455 (JCR 2017) Q1: Si

3) L. De Petrocellis, F. J. Arroyo, P. Orlando, A. Schiano-Moriello, R. M. Vitale, P. Amodeo, A. Sánchez, C. Roncero, G. Bianchini, M. A. Martín, P. López-Alvarado, J. C. Menéndez “Tetrahydroisoquinoline-derived Urea and 2,5-Diketopiperazine Derivatives as Selective Antagonists of the Transient Receptor Potential Melastatin 8 (TRPM8) Channel Receptor and Antiprostata Cancer Agents” *J. Med. Chem.* **2016**, *59*, 5661–5683. *J. Med. Chem.* **2016**, *59*, 7697.
Calidad publicación: Índice de impacto: 6.253 (JCR 2017) Q1: Si

4) A. I. Almansour, N. Arumugam, R. Suresh Kumar, S. M. Mahalingam, S. Sau, G. Bianchini, J. C. Menéndez, H. A. Ghabbour “Design, Synthesis and Antiproliferative Activity of Decarbonyl Luotonin Analogues” *Eur. J. Med. Chem.* **2017**, *138*, 932–941.
Calidad publicación: Índice de impacto: 4.816 (JCR 2017) Q1: Si

5) E. Uliassi, G. Fiorani, R. L. Krauth-Siegel, C. Bergamini, R. Fato, G. Bianchini, J. C. Menéndez, M. T. Molina, E. López-Montero, F. Falchi, A. Cavalli, S. Gul, M. Kuzikov, B. Ellinger, G. Witt, C. B. Moraes, L. H. Freitas-Junior, C. Borsari, M. P. Costi, M. L. Bolognesi “Crassiflorone Derivatives that Inhibit Trypanosoma Brucei Glyceraldehyde-3-phosphate Dehydrogenase (TbGAPDH) and Trypanosoma Cruzi Trypanothione Reductase (TcTR) and Display Activity Against Trypanosoma Brucei Parasites” *Eur. J. Med. Chem.* **2017**, *138*, 138–148.
Calidad publicación: Índice de impacto: 4.816 (JCR 2017) Q1: Si