



**Ministerio de Economía y Competitividad.
Secretaría de Estado de Investigación,
Desarrollo e Innovación**

Currículum

Nombre: Sonsoles Martín Santamaría

Fecha: 8 de Mayo de 2017

Apellidos: Martín Santamaría
DNI: 50087571-B

Fecha de nacimiento : 08-10-1970

Nombre: Sonsoles
Sexo: M

Situación profesional actual

Entidad: CSIC
Facultad, Escuela o Instituto: Centro de Investigaciones Biológicas
Depto./Secc./Unidad estr.: Departamento de Biología Química y Física
Dirección postal: C/ Ramiro de Maeztu, 9. 28040-Madrid, España.

Teléfono (indicar prefijo, número y extensión): 91-8373112 (Ext. 4389)

Fax:

Correo electrónico: smsantamaria@cib.csic.es

Especialización (Códigos UNESCO): Química Orgánica (2306), Química Farmacéutica (2390), Bioquímica-Química de macromoléculas biológicas (2302-91)

Categoría profesional: Científico Titular

Fecha de inicio: 06-06-2014

Situación administrativa

Plantilla

Contratado

Interino

Becario

Otras situaciones especificar:

Dedicación

A tiempo completo

A tiempo parcial

Líneas de investigación

Breve descripción, por medio de palabras claves, de la especialización y líneas de investigación actuales.

Reconocimiento molecular, diseño de fármacos, diseño de sondas biológicas, interacciones ligando-receptor, interacciones proteína-proteína, modelado molecular, química computacional, análisis conformacional. Química biológica. Química médica. Receptores *Toll*-like. Galectinas. Glicobiología.

Formación académica

Titulación superior	Centro	Fecha
Licenciada en Farmacia	Facultad de Farmacia, Universidad Complutense de Madrid	Junio-1993

Doctorado	Centro	Fecha
Doctora en Farmacia	Facultad de Farmacia, Universidad Complutense de Madrid	25-09-1998

Actividades anteriores de carácter científico profesional

Fecha de inicio	Fecha de finalización	PUESTO	Centro	INSTITUCIÓN
01-04-1994	31-12-1997	Becaria Predoctoral UCM	Departamento de Química Orgánica y Farmacéutica. Facultad de Farmacia	Universidad Complutense de Madrid
01-01-1998	01-05-1998	Profesora-Coordinadora	Apotheca, Centro de Estudios Farmacéuticos, S. L.	
01-11-1998	31-08-2000	Investigadora Postdoctoral	Department of Chemistry	Imperial College London
11-09-2000	31-01-2001	Becaria Postdoctoral Lab. Knoll	Planta Piloto de Química Fina	Universidad de Alcalá
01-04-2001	31-07-2003	Becaria Postdoctoral NFCR (National Foundation for Cancer Research) y Lab. PharmaMar	Departamento de Farmacología	Universidad de Alcalá
Julio-2003	--	Contrato Postdoctoral CAM (Comunidad Autónoma de Madrid)	Concedido, no disfrutado	Universidad Complutense de Madrid
01-03-2004	14-12-2008	Contrato Ramón y Cajal	Facultad de Farmacia	Universidad CEU San Pablo
15-12-2008	20-12-2011	Profesor Adjunto	Facultad de Farmacia	Universidad CEU San Pablo
20-12-2011	22-12-2011	Profesor Agregado	Facultad de Farmacia	Universidad CEU San Pablo
22-12-2011	05-06-2014	Profesor Titular	Facultad de Farmacia	Universidad CEU San Pablo

Idiomas (R = regular, B = bien, C = correctamente)

Idioma	Habla	Lee	Escribe
Inglés	C	C	C
Francés	B	B	B

Participación en proyectos de I+D+i financiados en convocatorias públicas.

(nacionales y/o internacionales)

Título del proyecto: Síntesis y estudio como inhibidores de MDR (MULTI DRUG RESISTANCE) de compuestos relacionados con ardeemina.

Entidad financiadora: C.I.C.Y.T. Plan Nacional I + D. Convocatoria 1994

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 20-05-94 hasta: 20-05-97 Cuantía de la subvención: 78.000 €

Investigador responsable: Carmen Avendaño López

Número de investigadores participantes: 13

Título del proyecto: Síntesis y evaluación biológica de quimiosensibilizadores en la terapia antitumoral. Inhibidores de MDR mediada por glicoproteínas-P.

Entidad financiadora: C.I.C.Y.T. Plan Nacional I + D. Convocatoria 1996

Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid

Duración, desde: 01-03-97 hasta: 01-03-01 Cuantía de la subvención: 78.000 €

Investigador responsable: Carmen Avendaño López

Número de investigadores participantes: 13

Título del proyecto: Adrenomedulina: una nueva diana farmacológica para el diseño y síntesis de moduladores con potencial actividad antitumoral (ref.: 7/04)

Entidad financiadora: Fundación Universitaria San Pablo CEU. EVALUADO POR LA ANEP.

Entidades participantes: Universidad San Pablo-CEU.

Duración, desde: Diciembre 2004 hasta: Octubre 2006 Cuantía de la subvención: 26.000 €

Investigador responsable: Ana Ramos González

Número de investigadores participantes: 5

Título del proyecto: Adrenomedulina: una nueva diana para el diseño y síntesis de agentes antitumorales.

Entidad financiadora: CICYT (SAF 2005-02608)

Entidades participantes: Universidad San Pablo-CEU, CSIC y CNRS.

Duración, desde: 01-01-2006 hasta: 01-01-2009 Cuantía de la subvención: 142.800 €

Investigador responsable: Beatriz de Pascual-Teresa Fernández

Número de investigadores participantes: 10

Título del proyecto: Adrenomedulina: una nueva diana para el diseño y síntesis de agentes antitumorales

Entidad financiadora: Fundación Universitaria San Pablo CEU (Ref. USP-PC 15/06)

Entidades participantes: Universidad San Pablo-CEU.

Duración, desde: Octubre 2006 hasta: Septiembre 2007 Cuantía de la subvención: 5.500 €

Investigador responsable: Beatriz de Pascual-Teresa

Número de investigadores participantes: 7

Título del proyecto: Los lugares de unión del coenzima Q en los complejos respiratorios I y III como dianas farmacológicas en la prevención del envejecimiento y las enfermedades asociadas a la edad

Entidad financiadora: Comunidad Autónoma de Aragón (PM078/2006)

Entidades participantes: Universidad de Zaragoza, Universidad de Alcalá y Universidad San Pablo-CEU.

Duración, desde: 1-1-2007 hasta: 31-12-2008 Cuantía de la subvención: 51.357€

Investigador responsable: Eduardo Ruiz Pesini

Número de investigadores participantes: 13

Título del proyecto: Adrenomedulina: una nueva diana para el diseño y síntesis de agentes antitumorales
Entidad financiadora: Fundación Universitaria San Pablo CEU (Ref. USP-PC 11/07)
Entidades participantes: Universidad San Pablo-CEU.
Duración, desde: Octubre 2007 hasta: Octubre 2008 Cuantía de la subvención: 5.500 €
Investigador responsable: Beatriz de Pascual-Teresa
Número de investigadores participantes: 7

Título del proyecto: Diseño, Síntesis y Evaluación Farmacológica de Inhibidores de Metaloproteasa de la Matriz tipo 2 (MMP-2).
Entidad financiadora: CICYT (SAF 2008-00945)
Entidades participantes: Universidad San Pablo-CEU.
Duración, desde: 01-01-2009 hasta: 01-01-2012 Cuantía de la subvención: 75.000 € (más costes indirectos).
Investigador responsable: Beatriz de Pascual-Teresa Fernández
Número de investigadores participantes: 8

Título del proyecto: Chemogenomics in Drug Discovery: A Multidisciplinary Approach Emerging from the Medicinal Chemistry Perspective.
Entidad financiadora: Acción Complementaria MICINN CTQ2009-06270-E/BQU
Entidades participantes: Universidad San Pablo-CEU.
Duración, desde: 15-04-2009 hasta: 14-04-2010 Cuantía de la subvención: 3.000 €
Investigador responsable: Sonsoles Martín Santamaría
Número de investigadores participantes: 3.

Título del proyecto: Design, synthesis and 3D-QSAR study of small molecules targeting adrenomedullin and PAMP in several diseases.
Entidad financiadora: MICINN Acciones Integradas (FR2009-0062).
Entidades participantes: Universidad San Pablo-CEU y CNRS (France).
Duración, desde: 01-01-2010 hasta: 01-01-2012 Cuantía de la subvención: 9.000 €
Investigador responsable: Sonsoles Martín Santamaría
Número de investigadores participantes: 6

Título del proyecto: 1st Paul Ehrlich European Meeting in Pharmaceutical Studies.
Entidad financiadora: Acción Complementaria MICINN CTQ2010-11813-E/BQU
Entidades participantes: Universidad San Pablo-CEU, Universidad Complutense y Universidad de Alcalá.
Duración, desde: 01-06-2011 hasta: 31-05-2012 Cuantía de la subvención: 5.000 €
Investigador responsable: Beatriz de Pascual-Teresa Fernández
Número de investigadores participantes: 4.

Título del proyecto: Procesos de reconocimiento molecular de dianas terapéuticas involucradas en inmunidad e infección bacteriana. Aproximaciones desde la Química Computacional.
Entidad financiadora: Fundación Universitaria San Pablo CEU (USPCEU-PC14/2011).
Entidades participantes: Universidad CEU San Pablo.
Duración, desde: 01-10-2011 hasta: 30-09-2012 Cuantía de la subvención: 2.324 €
Investigador responsable: Sonsoles Martín Santamaría
Número de investigadores participantes: 1.

Título del proyecto: Reconocimiento molecular e interacciones en sistemas de interés biológico. Una visión desde la Química Biológica.

Entidad financiadora: Acción Complementaria MINECO CTQ2011-15820-E/BQU

Entidades participantes: Universidad CEU San Pablo.

Duración, desde: 01.07.2012 hasta: 31.12.2013 Cuantía de la subvención: 10.000 €

Investigador responsable: Sonsoles Martín Santamaría

Número de investigadores participantes: 1.

Título del proyecto: Procesos de reconocimiento molecular de dianas terapéuticas involucradas en inmunidad e infección bacteriana. Aproximaciones desde la Química Computacional.

Entidad financiadora: Fundación Universitaria San Pablo CEU (USPCEU-PC13/2012).

Entidades participantes: Universidad CEU San Pablo.

Duración, desde: 01-10-2012 hasta: 30-09-2013 Cuantía de la subvención: 8.500 €

Investigador responsable: Sonsoles Martín Santamaría

Número de investigadores participantes: 1 (+3 a lo largo de 2013).

Título del proyecto: Multivalent Glycosystems for Nanoscience – MultiGlycoNano.

Entidad financiadora: European Commission FP7 COST Action (CM1102)

Entidades participantes: Universität für Biodenkultur Wien, Ghent University, Academy of Sciences of the Czech Republic, Technical University of Denmark, University of Copenhagen, Abo Akademi University, University of Helsinki, Université Claude Bernard Lyon, CERMAV-CNRS, RWTH Aachen University, Christiana Albertina University of Kiel, National University of Ireland, University College Dublin, University of Florence, Università di Parma, University of Oslo, Universidade Nova de Lisboa, Universidade de Lisboa, CIC biomaGUNE, CSIC, ETH Zurich, Bangor University, Slovak Academy of Sciences, University of Belgrado.

Duración, desde: 28/06/2011 hasta: 06/11/2015 Cuantía de la subvención: 62,000 € (2012)

Investigador coordinador: Bruce Turnbull (Reino Unido)

Número de investigadores participantes: 17 países europeos.

Título del proyecto: Microbial cell surface determinants of virulence as targets for new therapeutics in Cystic Fibrosis.

Entidad financiadora: European Commission FP7 COST Action (BM1003)

Entidades participantes: Universita' Milano-Bicocca, Universidad CEU San Pablo, The Jan Kochanowski University of Humanities and Sciences, CSIC, CERMAV-CNRS, Research Center Borstel-Division of Structural Biochemistry, University of Zürich, Institute of Medical Microbiology and Hygiene, Newcastle University, Instituto Superior Técnico, Transplantation and Infectious Diseases San Raffaele Scientific Institute, Ghent University, Universita' di Roma Sapienza, Italian National Research Council, University of Lisboa, Ecole Supérieure de Biotechnologies de Strasbourg, Semmelweis University, Bulgarian Academy of Sciences Department of Morphology of Microorganisms and Electron Microscopy-Institute of Microbiology, University Ss Cyril and Methodius.

Duración, desde Mayo-2010 hasta Mayo-2014

Cuantía de la subvención: 60,000 € (2011); 87,400 € (2012); 139,000 € (2013); 117.6000 € (2014).

Investigador coordinador: Antonio Molinaro (Italia)

Grant Holder: Sonsoles Martín Santamaría.

Work Group 2 Leader: Sonsoles Martín Santamaría (WG2: Immunological and molecular basis of interaction of PAMPs with their receptors).

Número de investigadores participantes: 18 laboratorios de 11 países europeos.

Título del proyecto: Procesos de reconocimiento molecular de dianas terapéuticas involucradas en inmunidad e infección bacteriana. Aproximaciones desde la Química Computacional.

Entidad financiadora: MICINN (CTQ2011-22724)

Entidades participantes: Universidad CEU San Pablo (hasta 05.06.2014) y CSIC (desde 06.06.2014).

Duración, desde: 01-01-2012 hasta: 31-12-2015

Cuantía de la subvención: 84.000 € (costes directos) + 1 beca FPI

Investigador responsable: Sonsoles Martín Santamaría

Número de investigadores participantes: 5.

Título del proyecto: Discovery and validation of therapeutic targets: development of the MHIT platform
Entidad financiadora: CAM P2010/BMD-2353
Entidades participantes: Universidad Complutense de Madrid, CSIC (S. Martín Santamaría como grupo asociado).
Duración, desde: 2012 hasta: 2015 Cuantía de la subvención: 741.750 €
Investigador responsable: M^a Luz López Rodríguez
Número de investigadores participantes: 45.

Título del proyecto: GLYOPHARM. The Sugar Code: from (bio)chemical concept to clinics.
Entidad financiadora: European Commission - Marie Curie Initial Training Networks (ITN) FP7-PEOPLE-2012-ITN 317297.
Entidades participantes: CISC, Universidad CEU San Pablo, Ludwig-Maximilians-Universitaet (Munich), Universitaetsilnikum Heilderbeg, University College Dublin, Universidade do Minho, Univerzita Karlova de Praga, y empresas (Isosep Aktiebolag -Suecia-, Institute of Applied Technologies -República Checa-, Toscana Biomarkers -Italia-, Roche Diagnostics GMBH -Alemania-).
Duración, desde: 01.11.2012 hasta: 31.10.2016
Cuantía de la subvención: 3,005,458.30 € (Total); 239,881.62 € (CSICd partner).
Investigador coordinador: Dolores Solís (España)
Investigador responsable en el CSICd: Sonsoles Martín Santamaría
Número de investigadores participantes: 13 grupos de investigación de 7 países europeos.
www.glycopharm.eu

Título del proyecto: TOLLerant. Toll-Like Receptor 4 activation and function in diseases: an integrated chemical-biology approach.
Entidad financiadora: European Commission – Horizon2020 - Marie Curie MSCA-ITN-2014-ETN
Entidades participantes: CSIC (España), Univ. Milano-Bicocca (Italia), Univ. Federico II (Italia), CICbioGUNE (España), CICbiomaGUNE (España), Univ. Bielefeld (Alemania), Kemijski Institut (Eslovenia), VIB (Bélgica), DIOMUNE (España), LOFARMA (Italia).
Duración, desde: 01.01.2015 hasta: 31.12.2018
Cuantía de la subvención: 3,122,539.38 € (Total); 257,000 € (CSIC partner).
Investigador coordinador: Francesco Peri (Italia)
Investigador responsable en el CIB-CSIC: Sonsoles Martín Santamaría
Número de investigadores participantes: 10 grupos de investigación de 5 países europeos.
<http://www.tollerant.eu>

Título del proyecto: Procesos de reconocimiento molecular de dianas terapéuticas involucradas en inmunidad e infección bacteriana. Aproximaciones desde la Química Computacional.
Entidad financiadora: MINECO (CTQ2014-57141-R)
Entidades participantes: CSIC.
Duración, desde: 01-01-2015 hasta: 31-12-2018
Cuantía de la subvención: 108.000 € (costes directos) + 1 beca FPI
Investigador responsable: Sonsoles Martín Santamaría
Número de investigadores participantes: 5.

Publicaciones o documentos científico-técnicos

(CLAVE: L = libro completo, CL = capítulo de libro, A = artículo, R = "review", E = editor,
S = Documento científico-técnico restringido)

AUTORES/AS (p.o. de firma): **Sonsoles Martin-Santamaria**, F. L. Buenadicha, M. Espada, M. Söllhuber and C. Avendaño.

TÍTULO: Regio- and Diastereoselective Alkylation of 2-Substituted 2,4-Dihydro-1H-pyrazino[2,1-b]quinazoline-3,6-diones.

Revista: *Journal of Organic Chemistry*

Clave: A Volumen: 62 Páginas, inicial: 6424 final: 6428 Fecha: 1997

AUTORES (p.o. de firma): **Sonsoles Martin-Santamaria**, M. Espada and C. Avendaño.

TÍTULO: "Regio- and Diastereoselective Dialkylation of (4S)-2,4-Dimethyl-2,4-dihydro-1H-pyrazino[2,1-b]quinazoline-3,6-dione"

Revista: *Tetrahedron*

Clave: A Volumen: 53 Páginas, inicial: 16795 final: 16802 Fecha: 1997

AUTORES (p.o. de firma): **Sonsoles Martin-Santamaria**, M. Espada and C. Avendaño.

TÍTULO: "(4S)-2,4-Dimethyl-2,4-dihydro-3,6-dioxo-(1H)-pyrazino[2,1-b]quinazolyl Tosylate as an Electrophilic Glycine Template"

Revista: *Tetrahedron*

Clave: A Volumen: 55 Páginas, inicial: 1755 final: 1762 Fecha: 1999

AUTORES (p.o. de firma): **Sonsoles Martin-Santamaria**, M. Espada and C. Avendaño.

TÍTULO: "Synthesis and Stereochemistry of 11,11a-dihydroderivatives of 4(S)-2,4-dimethyl-2,4-dihydro-1(H)-pyrazino[2,1-b]quinazoline-3,6-diones. A new Transannular Rearrangement Proposal"

Revista: *Journal of Organic Chemistry*

Clave: A Volumen: 64 Páginas, inicial: 7233 final: 7235 Fecha: 1999

AUTORES (p.o. de firma): J. Banks, A. S. Batsanov, J. A. K. Howard, D. O'Hagan, H. S Rzepa and **S. Martín-Santamaría**.

TÍTULO: "The Preferred Conformation of α -Fluoroamides"

Revista: *Journal of Chemical Society. Perkin Transactions 2*

Clave: A Volumen: 11 Páginas, inicial: 2409 final: 2411 Fecha: 1999

AUTORES (p.o. de firma): M. A. Carroll, **S. Martín-Santamaría**, V. W. Pike, H. S. Rzepa, D. A. Widdowson.

TÍTULO: "An ab initio and MNDO-d SCF-MO Computational Study of Stereoelectronic Control in Extrusion Reactions of R2I-F Intermediates".

Revista: *Journal of Chemical Society. Perkin Transactions 2*

Clave: A Volumen: 12 Páginas, inicial: 2707 final: 2714 Fecha: 1999

AUTORES (p.o. de firma): **S. Martín-Santamaria**, M. A. Carroll, C. Carroll, C. D. Carter, V. W. Pike, H. Rzepa, D. A. Widdowson.

TÍTULO: "Fluorination of Heteroaromatic Iodonium Salts. Experimental Evidence Supporting Theoretical Prediction of the Selectivity of the Process"

Revista: *Chemical Communications*

Clave: A Volumen: 8 Páginas, inicial: 649 final: 650 Fecha: 2000

AUTORES (p.o. de firma): **S. Martín-Santamaría**, M. A. Carroll, V. W. Pike, H. Rzepa, D. A. Widdowson.
TÍTULO: "An ab initio and MNDO-d SCF-MO Computational Study of Extrusion Reactions of R2I-F Iodine (III) via Dimeric, Trimer and Tetrameric Transition States".

Revista: *Journal of Chemical Society. Perkin Transactions 2*

Clave: A Volumen: 10 Páginas, inicial: 2158 final: 2161 Fecha: 2000

AUTORES: **S. Martín-Santamaría**, B. Lavan and H. S. Rzepa.

TÍTULO: Hückel and Möbius Aromaticity and Chimeric Transition State Behaviour in the Pericyclic Reactions of [10], [14], [16] and [18] Annulenes.

Revista: *Journal of Chemical Society. Perkin Transactions 2*

Clave: A Volumen: 7 Páginas, inicial: 1415 final: 1417 Fecha: 2000

AUTORES: **S. Martín-Santamaría**, B. Lavan and H. S. Rzepa.

TÍTULO: Möbius Aromatics Arising from a C=C=C Ring Component.

Revista: *Chemical Communications*

Clave: A Volumen: 12 Páginas, inicial: 1089 final: 1090 Fecha: 2000

AUTORES: **S. Martín-Santamaría** and H. S. Rzepa.

TÍTULO: Double aromaticity and anti-aromaticity in Small Carbon Rings.

Revista: *Chemical Communications*

Clave: A Volumen: 12 Páginas, inicial: 1503 final: 1504 Fecha: 2000

AUTORES: **S. Martín-Santamaría** and H. S. Rzepa.

TÍTULO: Mobius and Hückel Molecular Orbitals arising from C=C=C components in Annulene rings.

Revista: *Journal of Chemical Society. Perkin Transactions 2*

Clave: A Volumen: 12 Páginas, inicial: 2372 final: 2377 Fecha: 2000

AUTORES: **S. Martín-Santamaría** and H. S. Rzepa.

TÍTULO: Twist localisation in Single, Double and Triple Twisted Mobius cyclacenes.

Revista: *Journal of Chemical Society. Perkin Transactions 2*

Clave: A Volumen: 12 Páginas, inicial: 2378 final: 2381 Fecha: 2000

AUTORES: **S. Martín-Santamaría**, R. Corzo-Suárez, C. Avendaño, M. Espada, F. Gago, S. García-Granda and H. S. Rzepa.

TÍTULO: Diastereoselective Reactions in Glycine Templates Containing an *ent*-Ardeemin Fragment.

Revista: *Journal of Organic Chemistry*

Clave: A Volumen: 67 Páginas, inicial: 2013 final: 2018 Fecha: 2002

AUTORES: P. Breccia, M. van Gool, R. Pérez-Fernández, **S. Martín-Santamaría**, F. Gago, P. Prados, J. de Mendoza.

TÍTULO: Guanidinium Receptors as Enantioselective Amino Acid Membrane Carriers.

Revista: *Journal of the American Chemical Society*

Clave: A Volumen: 125 Páginas, inicial: 8270 final: 8284 Fecha: 2003

AUTORES: C. Palomo, J. M. Aizpurua, A. Benito, J. I. Miranda, R. M. Fratila, C. Matute, M. Domercq, F. Gago, **S. Martín-Santamaría** and A. Linden.

TÍTULO: Development of a new family of conformationally restricted peptides as potent nucleators beta-turns. Design, synthesis, structure, and biological evaluation of beta-lactam peptide analogue of melanostatin.

Revista: *Journal of the American Chemical Society*

Clave: A Volumen: 125 Páginas, inicial: 16243 final: 16260 Fecha: 2003

AUTORES: J. Mendieta, **S. Martín-Santamaría**, J. Balzarini, M. J. Camarasa, M. J. Pérez-Pérez, F. Gago.

TÍTULO: Role of His-85 in the Catalytic Mechanism of Thymidine Phosphorylase as Assessed by Targeted Molecular Dynamics Simulations and Quantum Mechanical Calculations.

Revista: *Biochemistry*

Clave: A Volumen: 43 Páginas, inicial: 405 final: 414 Fecha: 2004

AUTORES: **Martin-Santamaría, S**; Munoz-Muriedas, J; Luque, FJ; Gago, F.

TÍTULO: Modulation of binding strength in several classes of active site inhibitors of acetylcholinesterase studied by comparative binding energy analysis.

Revista: *Journal of Medicinal Chemistry*

Clave: A Volumen: 47 Páginas, inicial: 4471 final: 4482 Fecha: 2004

AUTORES: Marco, E; **Martin-Santamaría, S**; Cuevas, C; Gago, F.

TÍTULO: Structural basis for the binding of didemnins to human elongation factor eEF1A and rationale for the potent antitumor activity of these marine natural products.

Revista: *Journal of Medicinal Chemistry*

Clave: A Volumen: 47 Páginas, inicial: 4439 final: 4452 Fecha: 2004

AUTORES: Mollinedo, F; Gajate, C; **Martin-Santamaría, S**; Gago, F.

TÍTULO: ET-18-OCH₃ (Edelfosine): A selective antitumour lipid targeting apoptosis through intracellular activation of Fas/CD95 death receptor.

Revista: *Current Medicinal Chemistry*

Clave: A Volumen: 11 Páginas, inicial: 3163 final: 3184 Fecha: 2004

AUTORES: García, M. A.; **Martín-Santamaría, S.**; Cacho, M.; Moreno de la Llave, F.; Julián, M.; Martínez, A.; de Pascual-Teresa, B.; Ramos, A.

TÍTULO: Synthesis, Biological Evaluation and 3D-QSAR Study of Small Molecule Positive Modulators of Adrenomedullin.

Revista: *Journal of Medicinal Chemistry*

Clave: A Volumen: 48 Páginas, inicial: 4068 final: 4075 Fecha: 2005

AUTORES (p.o. de firma): Miguel Julián, Mónica Cacho, Mario A. García, **Sonsoles Martín-Santamaría**, Beatriz de Pascual-Teresa, Ana Ramos, Alfredo Martínez and Frank Cuttitta.

TÍTULO: Adrenomedullin: a new target for the design of agonists and antagonists with interesting pharmacological activity.

Revista: *European Journal of Medicinal Chemistry*

Clave: R Volumen: 40 Páginas, inicial: 737 final: 750 Fecha: 2005

AUTORES (p.o. de firma): Mario A. Garcia, **Sonsoles Martín-Santamaría**, Beatriz de Pascual-Teresa, Ana Ramos, Miguel Julian, Alfredo Martinez.

TÍTULO: Adrenomedullin a new and promising target for drug discovery.

Revista: *Expert Opinion on Therapeutic Targets*

CLAVE: R Volumen: 10(2) Páginas, inicial: 304 final: 317 Fecha: 2006.

AUTORES (p.o. de firma): Priego, E. M; Pérez-Pérez, M. J.; von Fritjag Drabbe Kuenzel, J.; de Vries, H.; Ijzerman, A.P.; Camarasa, M.-J.; **Martín-Santamaría.S.***

TÍTULO: Selective Human Adenosine A₃ Antagonists based on Pyrido[2,1-*f*]purine-2,4-diones: Novel Features of hA₃ Antagonist Binding.

Revista: *ChemMedChem*

CLAVE: A Volumen: 3 (1) Páginas, inicial: 111 final: 119 Fecha: 2008.

AUTORES (p.o. de firma): **S. Martín-Santamaría**, J.-J. Rodríguez, S. de Pascual-Teresa, S. Gordon, M. Bengtsson, B. de Pascual-Teresa, A. Ramos.

TÍTULO: New Scaffolds for the Design of Selective Estrogen Receptor Modulators.

Revista: *Organic & Biomolecular Chemistry*

CLAVE: A Volumen: 6 (19) Páginas, inicial: 3486 final: 3496 Fecha: 2008.

AUTORES (p.o. de firma): V. Roldós, **S. Martín-Santamaría**, M. Julián, A. Martínez, L. Choulier, D. Altschuh, B. de Pascual-Teresa, A. Ramos.

TÍTULO: Small molecule negative modulators of adrenomedullin: design, synthesis, and 3D-QSAR study.

Revista: *ChemMedChem*

CLAVE: A Volumen: 3 (9) Páginas, inicial: 1345 final: 1355 Fecha: 2008.

AUTORES (p.o. de firma): J. I. Santos, A. Carvalho de Souza, F. J. Cañada, **S. Martín-Santamaría,*** J. P. Kamerling,* J. Jiménez-Barbero.*

TÍTULO: Assessing carbohydrate-carbohydrate interactions by NMR spectroscopy: the trisaccharide epitope from the marine sponge *Microciona prolifera*.

Revista: *ChemBioChem*

CLAVE: A Volumen: 10 (3) Páginas, inicial: 511 final: 519 Fecha: 2009.

AUTORES (p.o. de firma): M. Morando, Y. Yao, **S. Martín-Santamaría**, Z. Zhu, T. Xu, F. J. Cañada, J. Jiménez-Barbero.

TÍTULO: Mimicking Chitin: Chemical Synthesis, Conformational Analysis, and Molecular Recognition of the $\beta(1\rightarrow3)$ N-acetylchitopentaose Analogue.

Revista: *Chemistry – A European Journal*

CLAVE: A Volumen: 16 Páginas, inicial: 4239 final: 4249 Fecha: 2010.

AUTORES (p.o. de firma): AUTORES (p.o. de firma): Francisco Corzana, Jesús H. Busto, Filipa Marcelo, Marisa García de Luis, Juan Luis Asensio, **Sonsoles Martín-Santamaría**, Jesús Jiménez-Barbero, Alberto Avenoza, and Jesús M. Peregrina.

TÍTULO: Engineering O-glycosylation Points in Non-extended Peptides: Implications for the Molecular Recognition of Short Tumor-associated Glycopeptides".

Revista: *Chemistry – A European Journal*

CLAVE: A Volumen: 17 Páginas, inicial: 3105 final: 3110 Fecha: 2011

AUTORES (p.o. de firma): **S. Martín-Santamaría**, S. André, E. Buzamet, R. Caraballo, G. Fernández-Cureses, M. Morando, J. P. Ribeiro, K. Ramírez-Gualito, B. de Pascual-Teresa, F. Javier Cañada, M. Menéndez, O. Ramström, J. Jiménez-Barbero, D. Solís, and H.-J. Gabius.

TÍTULO: Symmetric dithiodigalactoside: characterization of lectin-binding properties by solid-phase and cell inhibition assays, calorimetry, molecular modelling, and NMR spectroscopy and detection of selectivity between a plant toxin and human lectins.

Revista: *Org. Biomol. Chem.*

CLAVE: A Volumen: 9 Páginas, inicial: 5445 final: 5455 Fecha: 2011

AUTORES (p.o. de firma): J. M. Zapico, P. Serra, J. García-Sanmartín, K. Filipiak, R. J. Carbajo, A. K. Schott, A. Pineda-Lucena, A. Martínez, **S. Martín-Santamaría**, B. de Pascual-Teresa, A. Ramos.

TÍTULO: Potent and Selective "Clicked" MMP2 Inhibitors: Synthesis, Molecular Modeling and Biological Exploration.

Revista: *Org. Biomol. Chem.*

CLAVE: A Volumen: 21 Páginas, inicial: 4587 final: 4599 Fecha: 2011

AUTORES (p.o. de firma): F. Corzana, J. H. Busto, F. Marcelo, M. García de Luis, J. L. Asensio, **S. Martín-Santamaría**, J. Jiménez-Barbero, A. Avenoza, J. M. Peregrina.

TÍTULO: Rational design of a Tn antigen mimic.

Revista: *Chem. Comm.*

CLAVE: A Volumen: 47 Páginas, inicial: 5319 final: 5321 Fecha: 2011

AUTORES (p.o. de firma): M. Miller, I. Nesmelova, J. P. Ribeiro, V. Roldós, **S. Martín-Santamaría**, F. J. Cañada, M. Pang, A. Klyosov, S. André, L. G. Baum, J. Jiménez-Barbero, H.-J. Gabius, K. H. Mayo.

TÍTULO: Structural Aspects of Binding of $\{\alpha\}$ -Linked Digalactosides to Human Galectin-1.

Revista: *Glycobiology*

CLAVE: A Volumen: 21 Páginas, inicial: 1627 final: 1641 Fecha: 2011

AUTORES (p.o. de firma): Swider R, Maslyk M, **Martin-Santamaria S**, Ramos A, de Pascual-Teresa B.

TÍTULO: Multisite-directed inhibitors of protein kinase CK2: new challenges.

Revista: *Mol Cell Biochem*

CLAVE: A Volumen: 356 Páginas, inicial: 117 final: 119 Fecha: 2011

AUTORES (p.o. de firma): Perez-Castells J, **Martin-Santamaria S**, Nieto L, Ramos A, Martinez A, de Pascual-Teresa B, Jimenez-Barbero J.

TÍTULO: Structure of micelle-bound adrenomedullin, a first step towards the analysis of its interactions with receptors and small molecules.

Revista: *Biopolymers*

CLAVE: A Volumen: 97 Páginas, inicial: 45 final: 53 Fecha: 2012

AUTORES (p.o. de firma): Hidalgo M., **Martin-Santamaria S**, Recio I., Sanchez-Moreno C., de Pascual-Teresa B., Rimbach G., de Pascual-Teresa S.

TÍTULO: Potential anti-inflammatory, anti-adhesive, anti/estrogenic, and angiotensin-converting enzyme inhibitory activities of anthocyanins and their gut metabolites.

Revista: *Genes Nutr.*

CLAVE: A Volumen: 7 Páginas, inicial: 295 final: 306 Fecha: 2012

AUTORES (p.o. de firma): Rodríguez, J. J.; Filipiak, K.; Maslyk, M.; Ciepielski, J.; Demkowicz, S.; de Pascual-Teresa, S.; **Martín-Santamaría S.;*** de Pascual-Teresa, B.; Ramos A.*

TÍTULO: Towards β -selectivity in functional estrogen receptor antagonists.

Revista: *Org. Biomol. Chem.*

CLAVE: A Volumen: 10 Páginas, inicial: 7334 final: 7346 Fecha: 2012

AUTORES (p.o. de firma): Serra, P.; Bruczko, M.; Zapico, J. M.; Puckowska, A.; Garcia, M. A.; **Martin-Santamaria S.;*** Ramos, A.; de Pascual-Teresa, B.*

TÍTULO: MMP-2 selectivity in hydroxamate-type inhibitors.

Revista: *Curr. Med. Chem.*

CLAVE: R Volumen: 19 Páginas, inicial: 1036 final: 1064 Fecha: 2012

AUTORES (p.o. de firma): **Martin-Santamaria, S.;** Gabius, H.-J.; Jimenez-Barbero, J.

TÍTULO: Structural studies on the interaction of saccharides and glycomimetics with galectin-1: A 3D perspective using a combined molecular modeling and NMR approach

Revista: *Pure & Appl. Chem.*

CLAVE: R Volumen: 84 Páginas, inicial: 49 final: 64 Fecha: 2012

AUTORES (p.o. de firma): Demkowicz, S.; Filipiak, K.; Maslyk, M.; Ciepielski, J.; de Pascual-Teresa, S.; **Martin-Santamaria, S.;** de Pascual-Teresa, B.; Ramos, A.

TÍTULO: New clicked full agonists of the estrogen receptor beta.

Revista: *RSC Advances*

CLAVE: A Volumen: 3 Páginas, inicial: 3697 final: 3706 Fecha: 2013

AUTORES (p.o. de firma): Paloma Vidal, P.; Roldós, V.; Fernández-Alonso, M. C.; Cañada, F. J.; André, S.; Gabius, H.-J.; Jiménez-Barbero, J.;

* Espinosa, J. F.;

* **Martín-Santamaría, S.;***

TÍTULO: Conformational selection in glycomimetics. Human galectin-1 only recognizes syn- β type conformations of α 1,3-linked lactose and its C-glycosyl derivative.

Revista: *Chemistry – A European Journal*

CLAVE: A Volumen: 19 Páginas, inicial: 14581 final: 14590 Fecha: 2013

AUTORES (p.o. de firma): Marcelo F, Huecas S, Ruiz-Avila LB, Cañada FJ, Perona A, Poveda A, **Martin-Santamaria S,** Morreale A, Jimenez-Barbero J, Andreu JM

TÍTULO: Interactions of bacterial cell division protein FtsZ with C8-substituted guanine nucleotide inhibitors. A combined NMR, biochemical and molecular modeling perspective.

Revista: *J. Am. Chem. Soc.*

CLAVE: A Volumen: 135 Páginas, inicial: 16418 final: 16428 Fecha: 2013

AUTORES (p.o. de firma): Cighetti R, Ciaramelli C, Sestito SE, Zannoni I, Kubik Ł, Ardá-Freire A, Calabrese V, Granucci F, Jerala R, **Martín-Santamaría S,** Jiménez-Barbero J, Peri F.

TÍTULO: Modulation of CD14 and TLR4·MD-2 activities by a synthetic lipid A mimetic.

Revista: *Chembiochem*

CLAVE: A Volumen: 15 Páginas, inicial: 250 final: 258 Fecha: 2014

AUTORES (p.o. de firma): Madariaga D, Martínez-Sáez N, Somovilla VJ, García-García L, Berbis MÁ, Valero-González J, **Martín-Santamaría S**, Hurtado-Guerrero R, Asensio JL, Jiménez-Barbero J, Avenoza A, Busto JH, Corzana F, Peregrina JM.

TÍTULO: Serine versus Threonine Glycosylation with α -O-GalNAc: Unexpected Selectivity in Their Molecular Recognition with Lectins.

Revista: *Chemistry – A European Journal*.

CLAVE: A Volumen: 20 Páginas, inicial: 12616 final: 12627 Fecha: 2014

AUTORES (p.o. de firma): Xu B, Unione L, Sardinha J, Wu S, Ethève-Quellejeu M, Pilar Rauter A, Blériot Y, Zhang Y, **Martín-Santamaría S**, Díaz D, Jiménez-Barbero J, Sollogoub M.

TÍTULO: gem-Difluorocarbadisaccharides: Restoring the exo-Anomeric Effect.

Revista: *Angew Chem Int Ed Engl*.

CLAVE: A Volumen: 53 Páginas, inicial: 9597 final: 9602 Fecha: 2014

AUTORES (p.o. de firma): Molinaro, A.*; Holst, O.; Di Lorenzo, F.; Callaghan, M.; Nurisso, A.; D'Errico, G.; Zamyatina, A.; Peri, F.; Jiménez-Barbero, J.; Berisio, R.; Jerala, R.; Silipo, A.; **Martín-Santamaría, S.***

TÍTULO: Chemistry of lipid A: at the heart of innate immunity.

Revista: *Chem. Eur. J.*

CLAVE: Cover Volumen: 21 Páginas, inicial: 477 final: 477 Fecha: 2015.

AUTORES (p.o. de firma): Molinaro, A.*; Holst, O.; Di Lorenzo, F.; Callaghan, M.; Nurisso, A.; D'Errico, G.; Zamyatina, A.; Peri, F.; Jiménez-Barbero, J.; Berisio, R.; Jerala, R.; Silipo, A.; **Martín-Santamaría, S.***

TÍTULO: Chemistry of lipid A: at the heart of innate immunity.

Revista: *Chem. Eur. J.*

CLAVE: A Volumen: 21 Páginas, inicial: 500 final: 519 Fecha: 2015.

AUTORES (p.o. de firma): Unione L, Xu B, Díaz D, **Martín-Santamaría S**, Poveda A, Sardinha J, Rauter AP, Blériot Y, Zhang Y, Cañada FJ, Sollogoub M, Jiménez-Barbero J.

TÍTULO: Conformational Plasticity in Glycomimetics: Fluorocarbamethyl-L-idopyranosides Mimic the Intrinsic Dynamic Behaviour of Natural Idose Rings.

Revista: *Chem. Eur. J.*

CLAVE: A Volumen: 21 Páginas, inicial: 10513 final: 10521 Fecha: 2015.

AUTORES (p.o. de firma): J. Klett, J. Reeves, N. Oberhauser, L. Pérez-Regidor, **S. Martín-Santamaría.***

TÍTULO: Modulation of Toll-like receptor 4. Insights from X-ray crystallography and molecular modeling.

Revista: *Curr. Top. Med. Chem.*

CLAVE: A Volumen: 14 Páginas, inicial: 2672 final: 2683 Fecha: 2015.

AUTORES (p.o. de firma): Goya P,* **Martín-Santamaría S.***

TÍTULO: Editorial. Thematic Issue: Chemistry Bordering Biology: Highlights from the XXXIV Biennial Meeting of the RSEQ.

Revista: *Curr. Top. Med. Chem.*

CLAVE: A Volumen: 14 Páginas, inicial: 2625 final: 2626 Fecha: 2015.

AUTORES (p.o. de firma): Di Lorenzo, F.; Kubik, Ł.; Oblak, A.; Lorè, N. I.; Cigana, C.; Lanzetta, R.; Parrilli, M.; Hamad, M. A.; De Soyza, A.; Silipo, A.; Jerala, R.; Bragonzi, A.; Valvano, M. A.; **Martín-Santamaría, S.***; Molinaro, A.*

TÍTULO: Activation of Human Toll-like Receptor 4 (TLR4)-Myeloid Differentiation Factor 2 (MD-2) by Hypoacylated Lipopolysaccharide from a Clinical Isolate of *Burkholderia cenocepacia*.

Revista: *J. Biol. Chem.*

CLAVE: A Volumen: 290 Páginas, inicial: 21305 final: 21319 Fecha: 2015.

AUTORES (p.o. de firma): Ciaramelli C, Calabrese V, Sestito SE, Pérez-Regidor L, Klett J, Oblak A, Jerala R, Piazza M, **Martín-Santamaría S,*** Peri F.*

TÍTULO: Glycolipid-based TLR4 Modulators and Fluorescent Probes: Rational Design, Synthesis, and Biological Properties.

Revista: *Chem. Biol. & Drug Des.*

CLAVE: A Volumen: 88 Páginas, inicial: 217 final: 229 Fecha: 2016.

AUTORES (p.o. de firma): Ghirardello, M.; de Las Rivas, M.; Lacetera, A.; Delso, I.; Lira-Navarrete, E.; Tejero, T.; **Martín-Santamaría, S.***; Hurtado-Guerrero, R.*; Merino, P.*

TÍTULO: Glycomimetics Targeting Glycosyltransferases: Synthetic, Computational and Structural Studies of Less-Polar Conjugates.

Revista: *Chem. Eur. J.*

CLAVE: A Volumen: 22 Páginas, inicial: 7215 final: 7224 Fecha: 2016.

AUTORES (p.o. de firma): Vašl, J.; Oblak, A.; Petermelj, T. T.; Klett, J.; **Martín-Santamaría, S.**; Giannini, T. L.; Weiss, J. P.; Jerala R.

TÍTULO: Molecular Basis of the Functional Differences between Soluble Human Versus Murine MD-2: Role of Val135 in Transfer of Lipopolysaccharide from CD14 to MD-2.

Revista: *J. Immunol.*

CLAVE: A Volumen: 196 Páginas, inicial: 2309 final: 2318 Fecha: 2016.

AUTORES (p.o. de firma): Pérez-Regidor L, Zariouh M, Ortega L, **Martín-Santamaría S.***

TÍTULO: Virtual Screening Approaches towards the Discovery of Toll-Like Receptor Modulators.

Revista: *Int. J. Mol. Sci.*

CLAVE: R Volumen: 17 Páginas, inicial: pii: E1508 final: Fecha: 2016.

Review by invitation from the Editorial Board.

AUTORES (p.o. de firma): Billod JM, Lacetera A, Guzmán-Caldentey J, **Martín-Santamaría S.***

TÍTULO: Computational Approaches to Toll-Like Receptor 4 Modulation.

Revista: *Molecules*

CLAVE: R Volumen: 21 Páginas, inicial: pii: E994 final: Fecha: 2016.

Review by invitation from the Editorial Board.

AUTORES (p.o. de firma): Vašl, J.; Oblak, A.; Petermelj, T. T.; Klett, J.; **Martín-Santamaría, S.**; Giannini, T. L.; Weiss, J. P.; Jerala R.

TÍTULO: Molecular Basis of the Functional Differences between Soluble Human Versus Murine MD-2: Role of Val135 in Transfer of Lipopolysaccharide from CD14 to MD-2.

Revista: *J. Immunol.*

CLAVE: A Volumen: 196 Páginas, inicial: 2309 final: 2318 Fecha: 2016.

AUTORES (p.o. de firma): El-Halfawy, O. M.; Klett, J.; Ingram, R. J.; Loutet, S. A.; Murphy, M. E.; **Martín-Santamaría, S.**; Valvano, M. A.

TÍTULO: Antibiotic Capture by Bacterial Lipocalins Uncovers an Extracellular Mechanism of Intrinsic Antibiotic Resistance.

Revista: *mBio.*

CLAVE: A Volumen: 8 Páginas, inicial: pii: e00225-17 final: Fecha: 2017.

AUTORES (p.o. de firma): Sestito, S.; Facchini, F.; Morbioli, I.; Billod, J.-M.; **Martin-Santamaria, S.**; Casnati, A.; Sansone, F.; Peri, F.

TÍTULO: Amphiphilic guanidinocalixarenes inhibit lipopolysaccharide (LPS)- and lectin-stimulated Toll-like Receptor 4 (TLR4) signaling.

Revista: *J. Med. Chem.*

CLAVE: A Volumen: in press Páginas, inicial: final: Fecha: 2017.

Libros:

Editors: J. Jiménez-Barbero, J. Cañada, **S. Martín-Santamaría**. *Carbohydrates in Drug Design and Discovery*. **2015**. Royal Society of Chemistry, Cambridge, UK. ISBN: 978-1-84973-939-9. Book DOI: 10.1039/9781849739993

Capítulos de libro:

Lacetera, A.; Galante, S.; Jiménez-Barbero, J.; **Martín-Santamaría, S.** Glycans in Medicinal Chemistry. In: Reedijk, J. (Ed.) *Elsevier Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering*. **2016**. Elsevier. Waltham, MA. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-409547-2.11712-3>

Otras publicaciones:

AUTORES (p.o. de firma): Garcia, Mario A.; **Martín-Santamaría, S.**; Ramos, A.; de Pascual-Teresa, B.

TÍTULO: Are adrenomedullin positive modulators novel matrix metalloproteinase inhibitors?

Revista: *Anal. Real Acad. Nac. Farm.*

CLAVE: A Volumen: 73 Páginas, inicial: 703 final: 724 Fecha: 2007

AUTORES (p.o. de firma): Zapico, J. M.; Serra, P.; García Sanmartín, J.; Filipiak, K.; Martínez, A.; **Martín-Santamaría, S.**; de Pascual-Teresa, B.; Ramos, A.

TÍTULO: Synthesis of Selective MMP-2 Inhibitors Using Click Chemistry.

Revista: *Anal. Real Acad. Nac. Farm.*

CLAVE: A Volumen: 77 Páginas, inicial: 99 final: 117 Fecha: 2011

AUTORES (p.o. de firma): Maslyk, M.; Zapico, J. M.; Swider, R.; **Martín-Santamaría, S.**; Ramos, A.; de Pascual-Teresa, B.

TÍTULO: In search of a new prototype in CK2 inhibitors design.

Revista: ARKIVOC

CLAVE: A Volumen: Part3 Páginas, inicial: 54 final: 71 Fecha: 2011
Commemorative issue Prof. J. Alvarez-Builla.

Patentes y modelos de utilidad

Inventores (p.o. de firma): A. Ramos, J.-J. Rodríguez, S. Martín-Santamaría, B. de Pascual-Teresa, M. Hidalgo, P. P. López-Casas, B. Rubio-Viqueira.

Título: Nuevos Compuestos heterocíclicos como agentes antiproliferativos del cáncer de páncreas y colon.

N. de solicitud: P200801961 País de prioridad: España Fecha de prioridad:

Entidad titular: Fundación Universitaria San Pablo-CEU y Hospital de Madrid.

Países a los que se ha extendido: ninguno

Empresa/s que la están explotando: ninguna

Inventores (p.o. de firma): A. Ramos, B. de Pascual-Teresa, J. M. Zapico, B. Fabre, A. Puckowska, S. Martín-Santamaría, P. Serra, M. Bruczko, K. Filipiak, A. Martínez, J. García-Sanmartín.

Título: Nuevos hidroxamatos como inhibidores de metaloproteasa de la matriz tipo 2 (MMP2)

N. de solicitud: P201200069 País de prioridad: España

Fecha de prioridad: 25/01/2012

Entidad titular: Universidad CEU San Pablo

Países a los que se ha extendido: ninguno

Empresa/s que la están explotando: ninguna

CONFERENCIAS Y SEMINARIOS IMPARTIDOS POR INVITACIÓN (no se incluyen congresos)

- "*Molecular Modelling of Ligand-Receptor Binding*". Centro de Investigaciones Biológicas CSIC. 3 de Octubre de 2007.

- "*Applications of Molecular Modelling to the Study of Molecular Recognition*" dentro del "Network Course on Biophysical Techniques" organizado por Marie Curie Research Training Network DYNAMIC. Instituto de Química Física Rocasolano CSIC. 30 de Septiembre de 2008.

- "*Aplicaciones recientes del Modelado Molecular al Diseño de Fármacos*". 5 de Febrero de 2009. Parque Científico de Barcelona.

- IX Jornadas de Química Farmacéutica. Facultad de Farmacia, Universidad del País Vasco. Vitoria, 3 y 4 de Noviembre de 2009:

- "*Recent Applications of Molecular Modeling to the Design of Ligands with Pharmacological Activity*"

- "*Combined NMR and Molecular Modeling Applications to some Problems of Molecular Recognition*"

- "*Aplicaciones recientes del modelado molecular al diseño de ligandos con actividad farmacológica*". Instituto de Química Orgánica General CSIC. 16 de Diciembre de 2009.

- "*Diseño de fármacos: Combinación de métodos directos e indirectos aplicados al estudio de la unión ligando-receptor*". Universidad de Valencia. 4 de Marzo de 2010.

- Conferencia invitada. Centro de Investigaciones Biológicas CIB-CSIC. Madrid. 24 de Marzo de 2011.
- "Molecular modeling as a tool to investigate molecular recognition processes". École Supérieure de Biotechnologie de Strasbourg (ESBS) -Universidad de Estrasburgo, Francia. 8 de Abril de 2011.
- Seminario en la Escuela de Docking. Universidad de Alcalá. Curso de verano. Alcalá de Henares, Junio de 2011.
- "Molecular recognition processes in Glycobiology. Some examples from the molecular modelling approach". Università degli Studi di Milano-Bicocca. Milán, Italia. 27 de Marzo de 2012.
- "Computational modeling in Glycobiology: some examples". Section des Sciences Pharmaceutiques. Université de Genève, Université de Lausanne. Ginebra, Suiza. 11 de Junio de 2012.
- "Computational approaches for the study of molecular recognition in immunity and infection". Winter Training School COST Action BM1003. Madrid, España. 24 de Enero de 2013.
- "Computational approaches for the study of molecular recognition in Glycobiology". 28^{ème} Séminaire de 3^{ème} Cycle en Sciences Pharmaceutiques "Innovation in Medicinal Chemistry: from biomass to safe and potent drug candidates". Zermatt, Switzerland. 9-11 Septiembre 2013.
- "Computational Investigations into Molecular Recognition Processes. Galectins and Toll-like receptors". Network Closing workshop. Marie Curie Research Training Network DYNANO. Centro de Investigaciones Biológicas CSIC. 30 de Septiembre de 2013.
- "TLR4/MD2 recognition by modulators. Molecular modeling approaches". Conferencia invitada. Symposium COST Action BM1003. Universidad CEU San Pablo, Madrid. 4 de diciembre de 2013.
- "Computational Chemical Biology: molecular recognition processes of therapeutic targets". Conferencia invitada. Centro de Investigaciones Biológicas CSIC. 9 de Diciembre de 2013.
- "Molecular targets in Leishmaniasis". Conferencia invitada dentro del Máster en Enfermedades tropicales. Universidad de Valencia. 20 de Mayo de 2014.
- "Using your funds. The Grant Holder experience". Jornada sobre COST Action. Conferencia invitada. CICbioGUNE, Bilbao. 1 de octubre de 2014.
- "Pattern Recognition Receptors: The Computational Perspective into the Immunity Mechanisms". Conferencia invitada. ICIQ. Tarragona. 6 de mayo de 2016.
- "Pattern-recognition receptors: a computational perspective into their modulation". Conferencia invitada. OSAKA University, Japón. 24 de octubre de 2016.
- "Computational Chemistry tools to address biological questions. Toll-like receptor 4 and galectins". Conferencia invitada. Universidad del País Vasco, Deioa. 16 de marzo de 2017.

CONFERENCIAS DE DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA

- "*Career Development in Academia. Thoughts of a Pharmaceutical Chemist*". Course on Career Development. Marie Curie Research Training Network NODPERCEPTION, 24th September 2009. Roma.
- "*Fármacos: el camino desde la química hasta la actividad biológica*". Universidad de Valencia. 11 de Marzo de 2011. Ciclo Año Internacional de la Química.
- "*GLYCOPHARM: un proyecto Marie Curie en nuestra universidad*". Universidad CEU San Pablo. Alumnos de Grado en Farmacia y Biotecnología. Asociación de Estudiantes de Farmacia. 29 de Abril de 2013.
- "*LA QUÍMICA COMPUTACIONAL EN EL ESTUDIO DE BIOMOLÉCULAS Y EN EL DISEÑO DE FÁRMACOS: LA PERSPECTIVA 3D*". I Jornada de Promoción de la Investigación Básica para Estudiantes de Ciencias e Ingenierías. Universidad Rey Juan Carlos. Campus de Móstoles. 8 de Abril de 2016.

ARTÍCULOS DE DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA

- "SERMs: un largo camino desde el tamoxifeno hasta las nuevas estrategias para el diseño de fármacos más selectivos". Sonsoles Martín-Santamaría,* José Juan Rodríguez, Maciej M. Maslyk, Beatriz de Pascual-Teresa, Ana Ramos.* *Anales de Química*, **2010**, 3, 199-206.
- "Química Biológica: una disciplina emergente". Sonsoles Martín Santamaría. Revista de la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular, **2011**, 169, 23-26.

Estancias en centros extranjeros
(estancias continuadas superiores a un mes)

CLAVE: D = doctorado, P = posdoctoral, I = invitado, C = contratado, O = otras (especificar).

Centro: Computational and Structural Chemistry Section. Department of Chemistry. Imperial College London.
Localidad: Londres País: Reino Unido Fecha: 1998-2000 Duración (semanas): 96
Tema: Estudio computacional de:
- el control estereoeléctrico de reacciones de extrusión de intermedios del tipo R₂I-F (III),
- la conformación de péptidos α-fluorados,
- la aromaticidad tipo Möbius,
- el mecanismo de la transferencia asimétrica del ión Br⁺ entre alquenos,
- el mecanismo de reacciones catalizadas por Paladio
Clave: P

Centro: École Supérieure de Biotechnologie de Strasbourg (ESBS).
Localidad: Estrasburgo País: Francia Fecha: Octubre-2007 Duración (semanas): 2
Tema: Medidas de unión o binding a la Adrenomedulina de ligandos químicos de tamaño pequeño, mediante la técnica SPR (Surface Plasmon Resonance, espectroscopía de resonancia de plasmón en superficie) basada en biosensores (Biacore Instruments).
Clave: O (colaboración dentro del proyecto de investigación SAF2005-02608).

Centro: Universidad de Semmelweis (Departamento de Química Orgánica)
Localidad: Budapest País: Hungría Fecha: Diciembre-2011 Duración (semanas): 1
Tema: Estancia Docente - Programa Erasmus
Clave: I

Centro: Massachusetts Institute of Technology
Localidad: Cambridge País: Estados Unidos Fecha: Junio-Julio-2013 Duración (semanas): 6
Tema: Estancia en el grupo de Biofísica Computacional para el establecimiento de: 1) una colaboración científica basada en simulaciones REMD de complejos del TLR4/MD2; 2) colaboración para promover intercambios y estancias a nivel docente.
Clave: O (Estancia de movilidad para profesores)

Centro: Centre for Synthesis and Chemical Biology, University College Dublin
Localidad: Dublin País: Irlanda Fecha: 29 Junio-3 Julio-2015 Duración (semanas): 1
Tema: Estancia en el grupo del Prof. Oscarson, colaborador dentro de la red ITN GLYCOPHARM.
Clave: O (Estancia de investigación)

Contribuciones a congresos

1. AUTORES: S. Martín-Santamaría, F. Buenadicha, M. Söllhuber, M. Espada, C. Avendaño.

TÍTULO: Synthesis of tricyclic compounds related to ardeemin.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster

CONGRESO: II Italian-Spanish Joint Meeting of Pharmaceutical Chemistry.

PUBLICACIÓN: Libro de Abstracts.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Ferrara, Italia

AÑO: 1995

2. AUTORES: S. Martín-Santamaría, P. Cledera, A. Santamaría, C. Avendaño, N. Cabezas, M. Espada, J. C. Menéndez.

TÍTULO: Synthesis of analogues of natural MDR inhibitors.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster

CONGRESO: 11th International Conference on Organic Synthesis, ICOS-11.

PUBLICACIÓN: Libro de Abstracts.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Amsterdam, Holanda

AÑO: 1996

3. AUTORES: M. J. Aguirre, M. T. Bartolomé, F. Buenadicha, P. Cledera, S. Martín-Santamaría, C. Avendaño, M. Espada, J. C. Menéndez, M. Söllhuber.

TÍTULO: Regio and stereoselective alkylation of the 1,2,3,4,5,6-hexahydropyrazine[2,1-b]quinazoline-3,6-dione system.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster

CONGRESO: Spanish-Japanese Organic Chemistry Symposium.

PUBLICACIÓN: Libro de Abstracts.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Alicante, España.

AÑO: 1997

4. AUTORES: M. Fernández, S. Martín-Santamaría, E. De la Cuesta, M. Espada, C. Avendaño.

TÍTULO: Síntesis de análogos tricíclicos de N-acetilardeemina.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster

CONGRESO: X Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica.

PUBLICACIÓN: Libro de Abstracts.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Oviedo, España.

AÑO: 1997

5. AUTORES: S. Martín-Santamaría, M. Espada, C. Avendaño.

TÍTULO: Synthesis of analogues of a natural MDR inhibitor.

TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster

CONGRESO: 2nd International Meeting on Drugs from Natural Products.

PUBLICACIÓN: Libro de Abstracts.

LUGAR DE CELEBRACIÓN: Dublin, Irlanda.

AÑO: 1998

6. AUTORES: M. A. Carroll, S. Martín-Santamaría, V. W. Pike, H. S. Rzepa, D. A. Widdowson.
TÍTULO: An ab initio and MNDO-d SCF-MO computational study of stereoelectronic control in extrusion reactions of R₂-F intermediates.
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster
CONGRESO: 5 World Congress of Theoretically Oriented Chemists, WATOC-99.
PUBLICACIÓN: Libro de Abstracts.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Londres, Gran Bretaña.
AÑO: 1999
7. AUTORES: S. Martín-Santamaría, M. Espada, C. Avendaño.
TÍTULO: Nucleophilic addition to 2,4-dihydro-2,4-dimethyl-1H-pyrazino[2,1-b]quinazoline-3,6-dione derivatives.
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Póster
CONGRESO: XI Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica.
PUBLICACIÓN: Libro de Abstracts.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Valencia, España.
AÑO: 1999
8. AUTORES: H. S. Rzepa, S. Martín-Santamaría, D. A. Widdowson, M. Carroll, V. Pike.
TÍTULO: Computational Mechanistic Studies to Rationalize Unusual Stereo and Regiochemical Outcomes of Extrusion/Insertion Reactions of Iodine (III) and Palladium (0) Reagents.
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Oral Communication.
CONGRESO:
PUBLICACIÓN: Abstracts of Papers of the American Chemical Society. 2001, 221, 31-COMP, Part 1.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Estados Unidos.
AÑO: 2001
9. AUTORES: J. L. López Belmonte, J. J. Rodríguez Martín, O. Fajardo Rodríguez, M. Cacho, S. Martín-Santamaría, M. Julián, B. De Pascual-Teresa, A. Ramos.
TÍTULO: Diseño, Síntesis y Actividad Biológica de Agonistas de Adrenomedulina como Nuevos Agentes Antitumorales.
TIPO DE PARTICIPACIÓN: Comunicación Oral.
CONGRESO: I Congreso de Investigación de Pregrado en Ciencias de la Salud de la Comunidad de Madrid.
PUBLICACIÓN: Libro de Abstracts.
LUGAR DE CELEBRACIÓN: Madrid, España.
AÑO: 2004
Premio de Investigación "Agencia Laín Entralgo"
10. AUTHORS: S. Martín-Santamaría, M. A. García, M. Cacho, J. J. Rodríguez, V. Roldós, M. Julián, A. Martínez, A. Ramos, B. de Pascual-Teresa.
TITLE: Adrenomedullin: a new target for the design and synthesis of new drugs.
PARTICIPATION: **Oral Communication.**
CONGRESS: Joint Meeting on Medicinal Chemistry.
PUBLICATION: *Scientia Pharmaceutica*, **2005**, 73 (2), S53.
PLACE: Vienna, Austria.
DATE: 2005.

11. AUTHORS: M. A. García, S. Martín-Santamaría, M. Cacho, J. J. Rodríguez, V. Roldós, M. Julián, A. Martínez, A. Ramos, B. de Pascual-Teresa.

TITLE: Adrenomedulina: una nueva diana para el diseño y síntesis de nuevos agentes con actividad farmacológica.

PARTICIPATION: Comunicación Oral.

CONGRESS: XIV Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica.

PUBLICATION: Libro de Abstracts.

PLACE: Bilbao, España.

DATE: 2005.

Premio "Ramón Madroñero" de la Sociedad Española de Química Terapéutica.

12. AUTHORS: S. Martín-Santamaría, E. Soriano, J. J. Rodríguez, A. Ramos, B. de Pascual-Teresa.

TITLE: Study of the Binding of Selective Estrogen Receptor Modulators (SERMs).

PARTICIPATION: Poster.

CONGRESS: XIV Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica.

PUBLICATION: Libro de Abstracts.

PLACE: Bilbao, España.

DATE: 2005.

13. AUTHORS: Sonsoles Martín-Santamaría, Eva María Priego, Federico Gago, Jacobien von Fritjag Drabbe Kuenzel, Ad. P. IJzerman, María José Camarasa y María Jesús Pérez-Pérez.

TITLE: Nuevos Antagonistas Selectivos del Receptor de Adenosina A3 Derivados de Pirido[2,1-f]purina-2,4-diona. Estudios de Modelado Molecular de los Complejos Antagonista-Receptor y Adenosina-Receptor.

PARTICIPATION: **Comunicación Oral**.

CONGRESS: V Reunión de Ácidos Nucleicos y Nucleósidos.

PUBLICATION: Libro de Abstracts.

PLACE: Alcalá de Henares, España.

DATE: Octubre, 2005.

14. AUTHORS: Roldós, V., Zapico, J.M., Rodríguez, J. J., Martín-Santamaría, S., García, M., Julián, M., Martínez, R., Martínez, A., de Pascual-Teresa B., Ramos, A.

TITLE: Synthesis and biological evaluation of negative adrenomedullin modulators as antiangiogenic and anticancer drugs candidates.

PARTICIPATION: Poster.

CONGRESS: XIXth International Symposium on Medicinal Chemistry ISMC.

PUBLICATION: *Drugs of the Future*, **2006**, 31 (Suppl. A), 87.

PLACE: Istanbul, Turkey.

DATE: August 29- September 2, 2006.

15. AUTHORS: M. A. García, S. Martín-Santamaría, A. Martínez, A. Ramos and B. de Pascual-Teresa.

TITLE: CAN ADRENOMEDULLIN POSITIVE MODULATORS ACT AS MATRIX METALLOPROTEINASE-2 INHIBITORS?

PARTICIPATION: Poster.

CONGRESS: XIXth International Symposium on Medicinal Chemistry ISMC.

PUBLICATION: *Drugs of the Future*, **2006**, 31 (Suppl. A), 112-113.

PLACE: Istanbul, Turkey.

DATE: August 29- September 2, 2006.

16. AUTHORS: V. Roldós, J. M. Zapico, J. J. Rodríguez, S. Martín-Santamaría, M. A. García, M. Julián, B. de Pascual-Teresa, A. Ramos.

TITLE: Síntesis y Actividad Biológica de Moduladores Negativos de Adrenomedulina con Interés como Antitumorales.

PARTICIPATION: Comunicación Oral.

CONGRESS: XXI Reunión Bienal del Grupo de Química Orgánica de la RSEQ.

PUBLICATION: Libro de Abstracts.

PLACE: Valladolid, España.

DATE: 18-20 de Septiembre. 2006.

17. AUTHORS: M. A. García, S. Martín-Santamaría, J. J. Rodríguez, A. Martínez, A. Ramos and B. de Pascual-Teresa.

TITLE: Two targets for the discovery of new compounds to fight cancer: matrix metalloproteinases (MMPs) and Estrogen Receptor (ER).

PARTICIPATION: Póster.

CONGRESS: CNIO Cancer Conference: Medicinal Chemistry in Oncology.

PUBLICATION: Libro de Abstracts.

PLACE: Madrid, España.

DATE: Octubre. 2006.

18. AUTHORS: Zapico, J.M., Roldós, V., Martín-Santamaría, S., Julián, M., Martínez, R., Martínez, A., de Pascual-Teresa B., Ramos, A.

TITLE: Synthesis and biological evaluation of negative adrenomedullin modulators as antiangiogenic and anticancer drug candidates.

PARTICIPATION: Poster.

CONGRESS: First Iberic Meeting on Medicinal Chemistry. Anticancer Agents.

PUBLICATION: Book of Abstracts.

PLACE: Régua, Portugal.

DATE: 28-Abril to 1-May, 2007.

19. AUTHORS: Rodríguez, J. J., Martín-Santamaría, S., Pascual-Teresa, B., Ramos, A.

TITLE: Synthesis and Study of the Binding Mode of a New Class of Estrogen Receptor Ligands.

PARTICIPATION: Poster.

CONGRESS: First Iberic Meeting on Medicinal Chemistry. Anticancer Agents.

PUBLICATION: Book of Abstracts.

PLACE: Régua, Portugal.

DATE: 28-Abril to 1-May, 2007.

20. AUTHORS: V. Roldós, J. M. Zapico, S. Martín-Santamaría, M. Julián, B. de Pascual-Teresa, A. Ramos.

TITLE: Derivados de purina y piperidina como moduladores negativos de Adrenomedulina: Diseño, síntesis y evaluación farmacológica

PARTICIPATION: Poster.

CONGRESS: I Reunión Latinoamericana de Química Medicinal.

PUBLICATION: Libro de Abstracts.

PLACE: Montevideo, Uruguay.

DATE: Abril, 2007.

21. AUTHORS: Zapico, J.M., Roldós, V., Martín-Santamaría, S., Julián, M., de Pascual-Teresa B., Ramos, A.
TITLE: Synthesis of a series of piperidine and purine derivatives as first non-peptidic negative adrenomedullin modulators.
PARTICIPATION: Poster.
CONGRESS: 8th Tetrahedron Symposium Challenges in Organic Chemistry.
PUBLICATION: Book of Abstracts.
PLACE: Berlin, Germany.
DATE: June, 2007.
22. AUTHORS: Rodríguez, J. J., Martín-Santamaría, S., de Pascual-Teresa B., Ramos, A.
TITLE: Synthesis and Study on Subtype Selectivity of New Estrogen Receptor Ligands.
PARTICIPATION: Poster.
CONGRESS: 8th Tetrahedron Symposium Challenges in Organic Chemistry.
PUBLICATION: Book of Abstracts.
PLACE: Berlin, Germany.
DATE: June, 2007.
23. TITLE: *Human heparanase: structure, activity and alternative splicing.*
AUTHORS: I. Fernández, B. de Pascual-Teresa, S. Martín-Santamaría, A. Morán Ramallal, A. Astudillo, O. García, P. Menéndez, J. González, L. M. Quirós.
PARTICIPATION: Poster.
CONGRESS: 8th International Symposium on Biocatalysis and Biotransformations BIOTRANS.
PUBLICATION: Book of Abstracts.
PLACE: Oviedo (Spain).
DATE: 8-13 July, 2007.
24. TITLE: *From Adrenomedullin positive modulators to a new type of MMP-2 inhibitors.*
AUTHORS: M. A. García, S. Martín-Santamaría, A. Ramos and B. de Pascual-Teresa.
PARTICIPATION: Oral Communication
CONGRESS: International Symposium on Advances in Synthetic and Medicinal Chemistry
PUBLICATION: Book of Abstracts.
PLACE: St. Petersburg (Russia).
DATE: 27th-31st August, 2007.
25. AUTHORS: José Juan Rodríguez, Sonia de Pascual-Teresa, Sonsoles Martín-Santamaría, Beatriz de Pascual-Teresa, Ana Ramos.
TITLE: Synthesis, biological activity and docking studies of novel estrogen receptor ligand templates.
PARTICIPATION: Comunicación Oral.
CONGRESS: XV Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica.
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: El Escorial (Madrid), España.
DATE: 11-14 September, 2007.
26. AUTHORS: J. J. Rodríguez, S. Martín-Santamaría, B. de Pascual-Teresa, A. Ramos.
TITLE: Síntesis y estudio computacional del modo de unión de nuevos ligandos de los receptores estrogénicos alfa y beta.
PARTICIPATION: Póster.
CONGRESS: XXXI Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química.
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Toledo, España.
DATE: 9-14 September, 2007.

27. AUTHORS: Laurence Choulier, Sonsoles Martín-Santamaría, Virginia Roldós, Ana Ramos, Danièle Altschuh, Beatriz de Pascual-Teresa.
TITLE: SPR label-free ranking of small molecule negative modulators of adrenomedullin.
PARTICIPATION: Póster.
CONGRESS: 20th Meeting of the European Association for Cancer Research.
PUBLICATION: EJC SUPPLEMENTS 6 (9):152-152 2008.
PLACE: Lyon, Francia.
DATE: 5-8 Julio, 2008
28. AUTHORS: José María Zapico, Pilar Serra, Mario A. García, Sonsoles Martín-Santamaría, Ana Ramos, Beatriz de Pascual-Teresa.
TITLE: Computer-Aided Study of Matrix Metalloproteinase 2 Inhibitors. Identification of a Novel Zinc Binding Group Useful for the Design of MMP-2 Inhibitors.
PARTICIPATION: Póster.
CONGRESS: 2nd EuCheMS Chemistry Congress.
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Torino, Italia.
DATE: 16-20 September, 2008.
29. AUTHORS: Sonsoles Martín-Santamaría, Beatriz de Pascual-Teresa, Primitiva Menéndez, Javier González, Luis M. Quirós.
TITLE: Prometastatic Human Heparanase: Exploring Structure, and Catalytic Mechanism.
PARTICIPATION: **Oral Communication**.
CONGRESS: 2nd EuCheMS Chemistry Congress.
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Torino, Italia.
DATE: 16-20 September, 2008.
30. AUTHORS: I. Santos, A. Carvalho de Souza, F. J. Cañada, J. P. Kamerling, S. Martín-Santamaría, J. Jiménez-Barbero.
TITLE: Multivalency in Carbohydrate-Carbohydrate Interactions. A 3D View by Using NMR.
PARTICIPATION: Póster.
CONGRESS: IV Biental del Grupo Especializado de RMN de la RSEQ (GERMN) - I Reunión Ibérica RMN.
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Sevilla, España.
DATE: 21-24 Septiembre 2008.
31. AUTHORS: José-Juan Rodríguez, Sonia de Pascual-Teresa, Beatriz de Pascual-Teresa, Ana Ramos, Sonsoles Martín-Santamaría.
TITLE: NEW SCAFFOLDS FOR THE DESIGN OF SELECTIVE ESTROGEN RECEPTOR MODULATORS.
PARTICIPATION: **Comunicación Oral**.
CONGRESS: V Simposio Investigadores Jóvenes RSEQ-SIGMA-ALDRICH.
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Santiago de Compostela, España.
DATE: 9-12 Noviembre, 2008.
32. AUTHORS: A. Ramos, J. J. Rodríguez, S. Martín-Santamaría, B. de Pascual-Teresa, S. de Pascual-Teresa.
TITLE: DESIGN AND SYNTHESIS OF NEW SERMS BASED ON BENZO[*b*]NAPHTHO[1,2-*d*]FURANE AND BENZO[*b*]NAPHTHO[1,2-*d*]-THIOPHENE SCAFFOLDS.
PARTICIPATION: Oral Communication.
CONGRESS: Hungarian-Austrian-Czech-German-Greek-Italian-Polish-Slovak-Slovenian Joint Meeting in Medicinal Chemistry.
PUBLICATION: Proceedings.
PLACE: Budapest, Hungría.
DATE: 24-27 Junio, 2009.

33. AUTHORS: B. de Pascual-Teresa, J. M. Zapico, P. Serra, M. Bruczko, A. Puckowska, S. Martín-Santamaría, A. Ramos.
TITLE: Design and synthesis of new MMP-2 inhibitors using molecular modeling and click chemistry.
PARTICIPATION: Oral Communication.
CONGRESS: Hungarian-Austrian-Czech-German-Greek-Italian-Polish-Slovak-Slovenian Joint Meeting in Medicinal Chemistry.
PUBLICATION: Proceedings.
PLACE: Budapest, Hungría.
DATE: 24-27 Junio, 2009.
34. AUTHORS: Serra, P.; García, M.A.; Bruczko, M.; Zapico, J.M.; Ramos, A; Martín-Santamaría, S.; de Pascual-Teresa, B.
TITLE: Estudios de modelado molecular y QSAR-3D de la interacción entre inhibidores selectivos de tipo hidroxamato y MMP-2.
PARTICIPATION: Póster que fue seleccionado para realizar una Comunicación Oral.
CONGRESS: I Escuela de verano "Desarrollo de nuevos fármacos".
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Toledo, España.
DATE: 5-8 Julio, 2009.
35. AUTHORS: Jose Juan Rodríguez, Sonsoles Martín-Santamaría, Sonia de Pacual-Teresa, Beatriz de Pascual-Teresa, Ana Ramos.
TITLE: Diseño y síntesis de nuevos SERMs basados en sistemas de benzo[b]nafto[1,2-d]furano y benzo[b]nafto[1,2-d]-tiofeno.
PARTICIPATION: Póster.
CONGRESS: I Escuela de verano "Desarrollo de nuevos fármacos".
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Toledo, España.
DATE: 5-8 Julio, 2009.
36. AUTHORS : Maria Morando, Yanping Yao, Zhenyuan Zhu, Sonsoles Martín-Santamaría, F. Javier Cañada, Yongmin Zhang, Jesús Jiménez-Barbero.
TITLE: Chitin Mimics. NMR and Modelling Studies on the Solution Conformation of (β -GlcNAc1 \rightarrow 3)5- and its Interaction with Wheat Germ Agglutinin and Lysozyme.
PARTICIPATION: Póster.
CONGRESS: 15th European Carbohydrate Symposium.
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Vienna, Austria.
DATE: 19-24 Julio, 2009.
37. AUTHORS: José María Zapico, Pilar Serra, Ana Ramos, Sonsoles Martín-Santamaría, Beatriz de Pascual-Teresa.
TITLE: Nuevos inhibidores de MMP2. Diseño y síntesis utilizando herramientas de modelado molecular y química click.
PARTICIPATION: Conferencia Invitada.
CONGRESS: XXXII Reunión Bienal de la RSEQ.
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Oviedo, España.
DATE: 13-18 Septiembre, 2009.

38. AUTHORS: Joao P. Ribeiro, Karla Ramírez-Gualito, Sabine André, F. Javier Cañada, Beatriz de Pascual-Teresa, Hans-Joachim Gabius, Sonsoles Martín-Santamaría y Jesús Jiménez-Barbero.
TITLE: La interacción específica de la galectina-1 humana con miméticos de lactosa. Una visión 3D utilizando RMN y modelado molecular.
PARTICIPATION: **Comunicación Oral.**
CONGRESS: XXXII Reunión Bienal de la RSEQ.
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Oviedo, España.
DATE: 13-18 Septiembre, 2009.
39. AUTHORS: José Juan Rodríguez, Sonia de Pacual-Teresa, Elena Soriano, Beatriz de Pascual-Teresa, Sonsoles Martín-Santamaría, Ana Ramos.
TITLE: Diseño, Síntesis e Interacciones de Sistemas de Benzo[b]nafto[1,2-d] furano/tiofeno: de un Agonista a un Modulador Selectivo del Receptor Estrogénico.
PARTICIPATION: Póster.
CONGRESS: XXXII Reunión Bienal de la RSEQ.
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Oviedo, España.
DATE: 13-18 Septiembre, 2009.
40. AUTHORS: Anna Puckowska, Marta Bruczko, Jose Maria Zapico, Pilar Serra, Sonsoles Martin-Santamaria, Beatriz de Pascual-Teresa, Ana Ramos.
TITLE: Design and synthesis of novel MMP-2 inhibitors with hydroxamate and oxadiazole units as Zinc Binding Groups.
PARTICIPATION: Póster.
CONGRESS: Frontiers in Medicinal Chemistry: emerging targets, novel candidates and innovative strategies.
PUBLICATION: *Drugs of the Future*, **2009**, 34, 172.
PLACE: Barcelona, España.
DATE: 13-18 Septiembre, 2009.
41. AUTHORS: Serra, P.; Bruczko, M.; Ramos, A.; Martín-Santamaría, S.; de Pascual-Teresa, B.
TITLE: Computer-Aided Design of New Selective MMP-2 Inhibitors.
PARTICIPATION: Oral Communication.
CONGRESS: 6th Meeting of the European Network of Doctoral Studies in Pharmaceutical Sciences.
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Palermo, Italia.
DATE: 16-18 Noviembre, 2009.
42. AUTHORS: S. Martín-Santamaría, P. Serra, M. Bruczko, M. Maslyk, A. Ramos, B. de Pascual-Teresa.
TITLE: El receptor estrogénico y la MMP-2 como dianas farmacológicas. Algunos aspectos computacionales sobre el diseño de ligandos con actividad biológica.
PARTICIPATION: **Conferencia Invitada.**
CONGRESS: XXIII Bienal del Grupo Especializado de Química Orgánica de la RSEQ
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Murcia, España.
DATE: 16-18 Junio 2010.
43. AUTHORS: M. Maslyk, R. Swider, J. M. Zapico, S. Martín-Santamaría, A. Ramos, B. de Pascual-Teresa.
TITLE: In the search for a new prototype in the design of CK2 inhibitors.
PARTICIPATION: Oral Communication.
CONGRESS: 6th International Conference on Protein Kinase CK2.
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Cologne, Germany.
DATE: 7-10 Septiembre, 2010.

44. AUTHORS: A. Puckowska, M. Bruczko, J. M. Zapico, P. Serra, S. Martín-Santamaria, B. de Pascual-Teresa, A. Ramos.
TITLE: Docking, 3D-QSAR, and MD Simulations for the Design of "Clicked" MMP-2 Inhibitors.
PARTICIPATION: Póster.
CONGRESS: 18th European Symposium on Quantitative Structure Activity Relationships
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Rhodes, Greece.
DATE: 19-24 Septiembre, 2010.

45. AUTHORS: M. Maslyk, J. Ciepielski, K. Filipiak, S. de Pascual-Teresa, S. Martín-Santamaria, B. de Pascual-Teresa, A. Ramos.
TITLE: Molecular Modelling of Estrogen Receptor: Unraveling Behaviour and Regulation.
PARTICIPATION: Póster.
CONGRESS: 18th European Symposium on Quantitative Structure Activity Relationships
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Rhodes, Greece.
DATE: 19-24 Septiembre, 2010.

46. AUTHORS: S. Martín-Santamaría, P. Serra, M. Bruczko, M. Maslyk, A. Ramos, B. de Pascual-Teresa.
TITLE: Some computational aspects on the design of ligands with biological activity.
PARTICIPATION: **Conferencia Invitada**.
CONGRESS: 4th Meeting on High Performance Computing in Molecular Simulation
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Madrid, España.
DATE: Sept 30-Oct 1, 2010.

47. AUTHORS: S. Martín-Santamaría, M. Maslyk, M. Morando, K. Ramírez-Gualito, J. Ignacio Santos, A. Ramos, B. de Pascual-Teresa.
TITLE: Molecular modelling in molecular recognition: protein-protein, protein-carbohydrate and carbohydrate-carbohydrate interactions. Some examples.
PARTICIPATION: **Oral Communication**.
CONGRESS: 7th ERA-Flash Conference: *Bioinspired Chemistry*
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Santiago de Compostela, España.
DATE: Oct 24-27, 2010.

48. AUTHORS: S. Martín-Santamaría.
TITLE: Protein-carbohydrate and carbohydrate-carbohydrate interactions. Some examples from the molecular modelling perspective.
PARTICIPATION: **Invited lecture**.
CONGRESS: 16th European Carbohydrate Symposium EUROCARB2011
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Sorrento, Italy.
DATE: Jul 3-7, 2011.

49. AUTHORS: S. Martín-Santamaría, M. Morando, K. Ramírez-Gualito, V. Roldos.
TITLE: Molecular recognition processes in Glycobiology. Some examples from the molecular modelling approach.
PARTICIPATION: **Oral Communication**.
CONGRESS: Ninth Triennial Congress of the WORLD ASSOCIATION OF THEORETICAL AND COMPUTATIONAL CHEMISTS WATOC 2011
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Santiago de Compostela, España.
DATE: Jul 17-22, 2011.

50. AUTHORS: Sonsoles Martín Santamaría, Maria Morando, Karla Ramírez-Gualito, Virginia Roldós.
TITLE: Modeling of molecular recognition processes in Glycobiology. Some examples.
PARTICIPATION: **Conferencia Seleccionada**.
CONGRESS: XXXIII Reunión Bienal RSEQ
PUBLICATION: Libro de Abstracts.
PLACE: Valencia, España.
DATE: Jul 25-28, 2011.

51. Autores: A. Puckowska, M. Bruczko, J. M. Zapico, K. Filipiak, B. Fabre, P. Serra, S. Martín-Santamaría, B. de Pascual-Teresa, A. Ramos.
Título: New MMP2 inhibitors – synthesis and biological study
Tipo de participación: Póster
Congreso: 21 Polish Peptide Symposium
Publicación: Libro de Abstracts.
Lugar celebración: Bialystok, Poland
Fecha: 4-8 Septiembre 2011

52. Autores: Serra, P.; Bruczko, M.; Ramos, A.; Martín-Santamaría, S.; de Pascual-Teresa, B.
Título: Molecular Modeling Studies for the design of new selective MMP2 inhibitors.
Tipo de participación: Póster.
Congreso: XVI Congreso SEQT. From a classical to a new age in medicinal chemistry
Publicación: Libro de Abstracts.
Lugar celebración: Valencia (España)
Fecha: 18-21 Septiembre, 2011

53. Autores: José Antonio Pinilla, Sonsoles Martín-Santamaría.
Título: Molecular recognition and immunity. Computational studies of Toll-like receptor 4 modulation
Tipo de participación: Póster
Congreso: I Bienal del Grupo Especializado de Química Biológica – RSEQ
Publicación: Libro de Abstracts.
Lugar celebración: Santiago de Compostela (España)
Fecha: 8-9 Marzo 2012

Miembro del Comité Científico: Sonsoles Martín Santamaría.

54. Autores: José Antonio Pinilla, Sonsoles Martín-Santamaría.
Título: Toll-like Receptor 4 Modulators. Molecular Modelling Insights for Drug Design
Tipo de participación: **Comunicación oral**.
Congreso: XXIV Bienal del Grupo Especializado de Química Orgánica – RSEQ
Publicación: Libro de Abstracts.
Lugar celebración: San Sebastián (España)
Fecha: 11-13 de julio de 2012

55. Autores: J. A. Pinilla, L. Kubik, and S. Martín-Santamaría.
Título: Molecular recognition and immunity: molecular modelling of Toll-like receptor 4 modulators.
Tipo de participación: Comunicación flash.
Congreso: 26th International Carbohydrate Symposium ICS2012
Publicación: Libro de Abstracts.
Lugar celebración: Madrid (España)
Fecha: 22-26 Julio, 2012

Miembro del Comité Organizador: Sonsoles Martín Santamaría.

56. Autores: Marcelo, F.; Huecas. S.; Cañada F.J.; Perona, A.; Poveda, A.; Martín-Santamaría, S.; Morreale, A.; Andreu, J.M.; Jiménez-Barbero, J.

Título: The interactions of bacterial cell division protein FtsZ with C8-substituted guanine nucleotide inhibitors: NMR, biochemical and model insights.

Tipo de participación: Póster.

Congreso: 26th International Carbohydrate Symposium ICS2012

Publicación: Libro de Abstracts.

Lugar celebración: Madrid (España)

Fecha: 22-26 Julio, 2012.

57. Autores: Kubik Łukasz, Silipo Alba, Molinaro Antonio, Martín-Santamaría Sonsoles.

Título: Molecular basis of TLR4/MD2 recognition by modulators. Molecular modelling approaches.

Tipo de participación: Póster.

Congreso: 17th European Carbohydrate Symposium.

Publicación: Libro de Abstracts.

Lugar celebración: Tel-Aviv (Israel)

Fecha: 7-11 Julio, 2013.

58. Autores: Kubik Łukasz, Nils Oberhauser, Silipo Alba, Molinaro Antonio, Martín-Santamaría Sonsoles.

Título: Computational insights into TLR4/MD2 recognition by modulators.

Tipo de participación: Póster.

Congreso: Challenges in Chemical Biology. RSC-ISACS-11.

Publicación: Libro de Abstracts.

Lugar celebración: Boston (USA)

Fecha: 23-26 Julio, 2013.

59. Autores: Łukasz Kubik, José Antonio Pinilla, Nils Oberhauser, Lucía Pérez-Regidor, Sonsoles Martín-Santamaría.

Título: The chemistry of the TLR4/MD2 biology. Computational insights into Toll-like receptor 4 modulation.

Tipo de participación: Póster

Congreso: XXXIV Bienal de la RSEQ

Publicación: Libro de Abstracts.

Lugar celebración: Santander (España)

Fecha: 15-18 Septiembre 2013

Miembro del Comité Científico: Sonsoles Martín Santamaría.

60. Autores: Sonsoles Martín-Santamaría.

Título:

Tipo de participación: 2 Pósters.

Congreso: II Bienal del GE Química Biológica de la RSEQ & XIV Iberian Peptide Meeting.

Publicación: Libro de Abstracts.

Lugar celebración: Bilbao (España)

Fecha: 4-6 Febrero 2014.

Miembro del Comité Científico: Sonsoles Martín Santamaría.

61. Autores: Sonsoles Martín-Santamaría.

Título: TLR4/MD2 and galectins recognition by modulators. Molecular modeling approaches.

Tipo de participación: **Conferencia Invitada.**

Congreso: XI Jornadas de Carbohidratos

Publicación: Libro de Abstracts.

Lugar celebración: Logroño (España)

Fecha: 28-30 Mayo 2014

62. Autores: Sonsoles Martín-Santamaría.

Título: TLR4/MD-2 and galectins recognition by modulators. Molecular modelling insights.

Tipo de participación: **Conferencia Invitada.**
Congreso: 10th Spanish-Italian Symposium on Organic Chemistry
Publicación: Libro de Abstracts.
Lugar celebración: Florencia (Italia)
Fecha: 17-20 Julio 2014

62. Autores: Sonsoles Martín-Santamaría.
Título: Modulación de dianas implicadas en inmunidad e infección: TLR4 y galectinas. Aproximaciones desde la Química Computacional.

Tipo de participación: **Conferencia Invitada.**
Congreso: XVIII Semana Científica "Antonio González"
Publicación: Libro de Abstracts.
Lugar celebración: Tenerife (España)
Fecha: 8-9 Octubre 2014

63. Autores: Sonsoles Martín-Santamaría.
Título: Targets involved in immunity and bacterial infection. Molecular modeling and drug design.
Tipo de participación: **Conferencia Invitada.**
Congreso: Final Meeting COST Action BM1003 "Microbial cell surface determinants of virulence, antibiotic resistance and inflammation in different pathologies".

Publicación: Libro de Abstracts.
Lugar celebración: Nápoles (Italia)
Fecha: 13-14 Octubre 2014

Miembro de los Comités Organizador y Científico.

<http://www.cost-bm1003.info/docs/Napoli-13-14-Oct2014.pdf>

Autores: Sonsoles Martín-Santamaría.
Título: "PATTERN RECOGNITION RECEPTORS: Computational Approaches to the Innate Immunity Mechanisms"
Tipo de participación: **Conferencia Invitada.**
Congreso: ICIQ-FIC Spain-Japan Joint Symposium on Theoretical and Computational Chemistry for Complex Systems.
Tipo de actividad: Simposio Científico **Ámbito:** Internacional
Publicación: Libro de Abstracts.
Lugar celebración: ICIQ, Tarragona, Spain.
Fecha: 25-27 Noviembre 2015.

Autores: Sonsoles Martín-Santamaría.
Título: "PATTERN RECOGNITION RECEPTORS: Computational Approaches to the Innate Immunity Mechanisms"
Tipo de participación: **Conferencia Invitada.**
Congreso: One-day symposium on Computational Chemical Biology. Honoring Prof. Ken Houk.
Tipo de actividad: Simposio Científico **Ámbito:** Internacional
Publicación: Libro de Abstracts.
Lugar celebración: Logroño, Spain.
Fecha: 22 April 2016.

Autores: Sonsoles Martín-Santamaría.
Título: "Toll-like receptor 4: a computational walk into the molecular recognition process and modulation"
Tipo de participación: **Selected Oral Communication.**
Congreso: XXVIII International Carbohydrate Symposium
Tipo de actividad: Simposio Científico **Ámbito:** Internacional
Publicación: Libro de Abstracts.
Lugar celebración: New Orleans, USA.
Fecha: 17-21 July 2016.

Autores: Sonsoles Martín-Santamaría.

Título: "Innate immunity Toll-like receptors. Computational approaches to their molecular recognition events"

Tipo de participación: **Conferencia Invitada.**

Congreso: Japan-France-Spain Joint Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems

Tipo de actividad: Simposio Científico

Ámbito: Internacional

Publicación: Libro de Abstracts.

Lugar celebración: Kyoto, Japan.

Fecha: 26-28 Oct 2016.

Autores: Sonsoles Martín-Santamaría.

Título: Pattern recognition receptors and Immunity mechanisms. The computational perspective.

Tipo de participación: **Conferencia Plenaria.**

Congreso: Spanish-Japanese Symposium on Modern Synthetic Methodology.

Publicación: Libro de Abstracts.

Lugar celebración: Gijón (Spain)

Fecha: 24-26 April 2017

Tesis doctorales dirigidas

Título: "Study of ligand-receptor interactions by means of computational techniques. Adrenomedullin and metalloproteases as targets for the rational design of drugs".

Doctorando: Mario A. García García.

Universidad: Universidad CEU San Pablo.

Facultad: de Farmacia.

Fecha: Nov-2007. Sobresaliente *cum laude*. Mención europea.

Directores: Beatriz de Pascual-Teresa y Sonsoles Martín Santamaría.

Beca Predoctoral de la Comunidad Autónoma de Madrid.

Dos estancias predoctorales: grupo de la Prof Janet Thornton (European Bioinformatics Institute, Cambridge, U.K.) y

Centro de Investigación de los Laboratorios Janssen-Cilag (Toledo, España).

Después de un año trabajando en Novartis como Medical Project Leader, el Dr García trabaja en la actualidad en Stallergenes Iberica como Especialista de Producto.

Título: "Diseño, Síntesis y Evaluación Farmacológica de Nuevos Moduladores Selectivos del Receptor de Estrógenos (SERMs)".

Doctorando: **José Juan Rodríguez Martín**.

Universidad: Universidad CEU San Pablo.

Facultad: de Farmacia.

Fecha: 16-12-2011. Apto *cum laude*.

Directores: Ana Ramos González y Sonsoles Martín Santamaría.

Beca Predoctoral de la Fundación Universitaria San Pablo CEU.

Estancia predoctoral: Instituto del Frío, CSIC (Madrid, España). El Dr Rodríguez trabaja actualmente en su farmacia.

Título: "Computational strategies for the study of matrix metallo-proteases inhibition. Rational design of antitumoral agents".

Doctorando: **M^a del Pilar Serra Cárdenas**.

Universidad: Universidad CEU San Pablo.

Facultad: de Farmacia.

Fecha: 18-07-2012. Apto *cum laude*. Mención internacional.

Directores: Beatriz de Pascual-Teresa Fernández y Sonsoles Martín Santamaría.

Beca FPU: del Ministerio de Educación.

Dos estancias predoctorales: grupo del Prof Klebe (University of Marburg, Alemania) y Biosensor Group (École Supérieure de Biotechnologie de Strasbourg, CNRS, Francia). La Dra Serra trabaja en la actualidad para la empresa farmacéutica MSD.

Diplomas de Estudios Avanzados (DEA) DIRIGIDOS

TÍTULO: "Diseño, síntesis y evaluación biológica de moduladores selectivos del receptor de estrógenos (SERMs)"

DOCTORANDO/A: José Juan Rodríguez Martín. (Codirigido con la Dra. Ana Ramos)

UNIVERSIDAD: Universidad San Pablo CEU FACULTAD/ESCUELA: Facultad de Farmacia

FECHA DE LECTURA: Octubre-2006. CALIFICACIÓN: Sobresaliente.

TÍTULO: "Estrategias Computacionales para el estudio de la inhibición de Metaloproteasa de la Matriz. Diseño de inhibidores"

DOCTORANDO/A: M^a del Pilar Serra Cárdenas. (Codirigido con la Dra. Beatriz de Pascual-Teresa)

UNIVERSIDAD: Universidad San Pablo CEU FACULTAD/ESCUELA: Facultad de Farmacia

FECHA DE LECTURA: 10 de Julio-2009. CALIFICACIÓN: Sobresaliente.

Tesis doctorales en curso

Título: "Glicomimetics as drugs and probes. The computational chemical biology perspective".

Doctorando: **Alessandra Lacetera**

Universidad: Complutense.

Facultad: de Farmacia.

Fecha de incorporación: 08-05-2013

Fecha prevista de lectura: 16-06-2017.

Directores: Sonsoles Martín Santamaría.

Contrato Marie Curie – ITN Project GLYCOPHARM: European Commission.

Dos estancias predoctorales: grupo del Prof Oscarson (University College Dublin, Ireland) y del Prof Mullholand (University of Bristol, UK).

Título: "Molecular recognition processes of therapeutic targets involved in immunity and bacterial infection. Approaches from the Computational Chemistry".

Doctorando: **Lucía Pérez Regidor**

Universidad: Complutense.

Facultad: de Farmacia.

Fecha de incorporación: 01-09-2013

Fecha prevista de lectura: 22-09-2017.

Directores: Sonsoles Martín Santamaría.

Contrato FPI: MINECO.

Una estancia predoctoral: grupo del Prof Ross Walker (University of Los Angeles, California, USA).

Título del proyecto: "Molecular Pattern Recognition Receptors: Computational Chemistry Insights for Drug Design and Innate Immunity Modulation"

Doctorando: **Joan Guzmán Caldentey**.

Fecha de incorporación: 01-10-2014

Director: Sonsoles Martín Santamaría.

Contrato FPI: MINECO

Título del proyecto: "Molecular Pattern Recognition Receptors: Computational Chemistry Insights for Drug Design and Innate Immunity Modulation"

Doctorando: **Jean-Marc Billod**.

Fecha de incorporación: 09-04-2015

Director: Sonsoles Martín Santamaría.

Contrato Marie Curie – ITN Project TOLLerant: European Commission.

Supervisión de estancias de investigadores nacionales y extranjeros

- **Mouza Salah Al Neyadi**: Estudiante de Grado, Junio-2009. Estudios de *docking* de SERMs. Beca de la Universidad de Emiratos Árabes.
- **Dr Maciek Maslyk**. Investigador post-doctoral, Mayo-2009 a Mayo-2011. Beca EADS-CASA. Molecular modelling of estrogen receptors modulators, and protein-protein interactions governing estrogen receptors behaviour.
- **Marta Bruzcko**. Investigadora Predoctoral. Febrero-2009 a Febrero-2011. Beca EADS-CASA. Combined computational and experimental approaches to the study of selective MMP-2 inhibitors.
- **Karla Ramírez-Gualito** (Marzo-Abril 2010). Estancia predoctoral. Programa de Movilidad. Universidad de México.
- **Prof Gloria Rubiales** (Oct-2010). Estudios de docking de inhibidores de topoisomerasas. Programa de Movilidad del Profesorado. Universidad del País Vasco.
- **Lukasz Kubik**. Investigador Predoctoral. Mayo-2012 a Mayo-2013. Beca EADS-CASA. Molecular recognition processes of therapeutic targets involved in immunity and bacterial infection. Approaches from the Computational Chemistry.
- **Nils Oberhauser**. PhD student. Universidad de Ginebra (Directores: Prof. Carrupt y Dr Alessandra Nurisso). Short Term Scientific Mission. COST Action BM1003. 15-01-2013 a 15-03-2013. Docking studies of the interaction between TLR4 modulators and the regulatory protein MD-2.
- **Mattia Ghirardello**. FPU Predoctoral researcher. Feb-Mar-2015. FPU Mobility grant. "Ligand-receptor interactions by means of molecular docking". University of Zaragoza, Spain.
- **Florent Cochet**. Marie Curie fellowship. ITN TOLLerant. Predoctoral researcher. Apr-May-2016. Secondment within the TOLLerant ITN network. "Modeling and design of synthetic glycolipids interacting TLR4". University of Milano-Bicocca, Italy.
- **Clara Barrau**. Marie Curie fellowship. ITN TOLLerant. Predoctoral researcher. Apr-May-2017. Secondment within the TOLLerant ITN network. "Modeling of LPS interacting with bacterial membranes". University of Naples, Italy.

Supervisión de proyectos de Máster

- 2013/14. J. Guzmán.
- 2014/15. C. Fernández, I. A. Sánchez, and S. Ochoa.
- 2015/16. M. Fernández, A. López Martos and Malik Zariouh (University of Grenoble).
- 2016/17. E. Crisman.

Supervisión de estudiantes Erasmus (proyectos de investigación)

- 2012/13. Susanne Jäckel. Feb-2013 a Jun-2013. Universidad de Regensburg, DE.
- 2013/14. Jake Reeves. Sep-2013 a Jun-2014. Universidad de Surrey, UK.

Supervisión de proyectos fin de Licenciatura o Grado: 15 proyectos durante los cursos 2005/2014. 1 proyecto durante el curso 2015/16.

Experiencia en organización de actividades de I+D+i
Organización de congresos, seminarios, jornadas, etc., científicos-tecnológicos

Título: Química Computacional: una herramienta para la investigación del mecanismo de acción de los fármacos

Tipo de actividad: Taller

Ámbito: IV Semana de la Ciencia (Madrid)

Fecha: Noviembre de 2004

Título: Desarrollo de Tutoriales interactivos para la docencia de la Química Farmacéutica

Tipo de actividad: Jornada de Puertas Abiertas

Ámbito: V, VI, VII y VIII Semana de la Ciencia (Madrid)

Fecha: 2004, 2006, 2007 y 2008

Título: Del entendimiento de la biología al tratamiento de las enfermedades. Medicamentos Innovadores.

Tipo de actividad: Ciclo de Conferencias

Ámbito: VII, VIII, IX, X, XI y XII Semana de la Ciencia (Madrid)

Fecha: 2007, 2008, 2009, 2010, 2011 y 2012.

Título: Chemogenomics in Drug Discovery: A Multidisciplinary Approach Emerging from the Medicinal Chemistry Perspective

Tipo de actividad: Simposio Científico

Ámbito: Nacional

Fecha: 20-21 de Abril de 2009

Comité organizador

Título: Application of PET Imaging in the Discovery and Development of new Drugs: Design and Synthesis of PET Radioligands.

Tipo de actividad: Simposio Científico

Ámbito: Nacional

Fecha: 11 de mayo de 2010

Título: 1st Paul Ehrlich European Meeting in Pharmaceutical Studies

Tipo de actividad: Simposio Científico

Ámbito: Internacional

Fecha: 13-15 de Julio de 2011. Madrid.

Comité organizador

<http://www.farmacia.uspceu.com/pages/EuropeanNetworkDoctoral/7th-meeting-welcome.html>

Título: I Bienal del Grupo Especializado de Química Biológica- RSEQ

Tipo de actividad: Simposio Científico

Ámbito: Nacional

Fecha: 8-9 de Marzo de 2012. Santiago de Compostela.

Comité científico

<http://www.usc.es/qbrseq/>

Título: 26 International Carbohydrate Symposium

Tipo de actividad: Simposio Científico

Ámbito: Internacional

Fecha: 22-27 de Julio de 2012. Madrid.

Comité organizador

<http://www.ics2012madrid.com/index.html>

Título: Microbial infection from the chemistry perspective: the bottom-up approach.

Tipo de actividad: Winter Training School COST Action BM1003 **Ámbito:** Internacional

Fecha: 23-25 de Enero de 2013. Madrid.

Comités organizador y científico.

<http://www.cost-bm1003.info/docs/Madrid2012.pdf>

Título: XXXIV Reunión Bienal de la RSEQ

Tipo de actividad: Simposio Científico

Ámbito: Nacional

Fecha: 15-18 de Septiembre de 2013. Santander

Organizadora del simposium "Química en la frontera con la biología".

<http://rseq2013.unican.es/>

Título: Toll-like receptors: redefining innate immunity. The chemical biology approach.

Tipo de actividad: Symposium COST Action BM1003 **Ámbito:** Internacional

Fecha: 4 de Diciembre de 2013. Madrid.

Comités organizador y científico.

http://www.cost-bm1003.info/docs/Madrid_4-12-2013.pdf

Título: II Reunión Bienal del GE Química Biológica de la RSEQ & XIV Iberian Peptide Meeting.

Tipo de actividad: Simposio Científico **Ámbito:** Nacional

Fecha: 4-6 de Febrero de 2014. Bilbao

Comité científico

<http://www.quimicabiologica.es/meeting---epi.html>

Título: Microbial cell surface determinants of virulence, antibiotic resistance and inflammation in different pathologies

Tipo de actividad: Final Meeting COST Action BM1003 **Ámbito:** Internacional

Fecha: 13-15 de Octubre de 2014. Nápoles, Italia.

Comités organizador y científico.

<http://www.cost-bm1003.info/docs/Napoli-13-14-Oct2014.pdf>

Título: XXXV Reunión Bienal de la RSEQ

Tipo de actividad: Simposio Científico **Ámbito:** Nacional

Fecha: 19-23 de Julio de 2015. La Coruña

Comité científico y organizadora del simposium "Química en la frontera con la biología".

<http://www.bienal2015.cienciasudc.es/es/>

Título: Joint Spanish-Japanese Symposium

Japan-France-Spain Joint Symposium on Theoretical and Computational Science of Complex Systems

Tipo de actividad: Simposio Científico **Ámbito:** Internacional

Fecha: 23 Noviembre 2015, Madrid, Spain.

Chair del comité científico y organizado.

<http://madrid2016.cib.csic.es/>

Título: III Reunión Bienal del Grupo Especializado de Química Biológica de la RSEQ

Tipo de actividad: Simposio Científico **Ámbito:** Nacional

Fecha: 14-18 Marzo 2016. Madrid.

Co-chair de los comités científico y organizador.

<http://madrid2016.cib.csic.es/>

Título: 2nd TOLLerant Meeting.

Tipo de actividad: Simposio Científico **Ámbito:** Internacional

Fecha: 24-27 Mayo 2016. Madrid.

Chair de los comités científico y organizador.

Título: 6th EuCheMS 2016

Tipo de actividad: Simposio Científico **Ámbito:** Internacional

Fecha: 11-15 de septiembre de 2016. Sevilla.

Comité científico.

<http://euchems-seville2016.eu>

Título: XXXVI Reunión Bienal de la RSEQ

Tipo de actividad: Simposio Científico **Ámbito:** Nacional

Fecha: 15-29 de junio de 2017. Sitges.

Comité científico.

<http://www.bienal2017.com/index.php/en/>

Experiencia de gestión de I+D+i
Gestión de programas, planes y acciones de I+D+i

Título: Jornadas de Seguimiento científico-técnico de los Proyectos correspondientes al Programa de Ciencias y Tecnologías Químicas, Subprograma de Química Básica, CTQ/BQU MICINN.

Tipo de actividad: Participación como experta

Fecha: Años 2009, 2010, 2012 y 2013-2017 (como equipo de gestión).

Título: Panel de Química de Proyectos del Programa Nacional de Ciencia y Tecnología Básica (BQU), de la Dirección General de Programas y Transferencia de Conocimiento, MICINN.

Tipo de actividad: Participación como experta

Fecha: Años 2009, 2010 y 2012.

Título: Programa Nacional de Ciencia y Tecnología Básica (BQU), de la Dirección General de Programas y Transferencia de Conocimiento, MICINN.

Tipo de actividad: Miembro del equipo de Gestión de la Dirección General de Investigación, MINECO.

Fecha: Desde 01-03-2013.

Otros méritos o aclaraciones que se desee hacer constar

TRES TRAMOS DE INVESTIGACIÓN ACREDITADOS POR LA CNEAI. 1997-2002, 2003-2008 y 2009-14.

ACREDITACIÓN POR LA A.N.E.C.A. como Profesor Titular. Año 2010.

ACREDITACIÓN MICINN de elegibilidad para el **Programa I3 POSITIVA**. Obtenida en junio-2008.

PREMIOS:

* Premio de Licenciatura "Promoción Facultad de Farmacia 1963/69", correspondiente al curso académico 1992/93.

* Premio Extraordinario de Doctorado, correspondiente al curso académico 1997/98.

* Premios a trabajos de investigación: "Agencia Laín Entralgo" (abril, 2004), "Ramón Madroñero" de la Sociedad Española de Química Terapéutica (septiembre-2005), "Colegio de Farmacéuticos" de la Real Academia Nacional de Farmacia (enero-2007) y "Colegio de Farmacéuticos" de la Real Academia Nacional de Farmacia (enero-2011).

Colaboradora de la Dirección General de Investigación (programa BQU), MINECO. Desde 01-03-2013.

PARTICIPACIÓN EN COMISIONES DE EVALUACIÓN:

* Experta y Vicechair del Panel de Química del programa People FP7 Marie Curie IXF Fellowships (Comisión Europea). 2008, 2010, 2011, 2012, 2014, 2015, 2016.

* Experta del Panel de Química del programa People FP7 Marie Curie ITN Fellowships (Comisión Europea). 2013.

* Participación como experta en las Jornadas de Seguimiento científico-técnico de los Proyectos correspondientes al Programa de Ciencias y Tecnologías Químicas, Subprograma de Química Básica, CTQ/BQU MICINN. 2009, 2010, 2012, 2013, 2014, 2015 y 2017.

* Participación como experta en el Panel de Química de Proyectos del Programa Nacional de Ciencia y Tecnología Básica (BQU), de la Dirección General de Programas y Transferencia de Conocimiento, MICINN. 2009, 2010, 2012 y 2013.

* Evaluadora de solicitudes de becas de Formación de Personal Universitario FPU. Dirección General de Política Universitaria. Ministerio de Educación. Desde 2010.

* Evaluadora de Proyectos Bilaterales NSF-MICINN. 2009-2011.

* Evaluadora ocasional de:

- propuestas de acceso al Superordenador Finis Terrae. ICTS-CESGA. Xunta de Galicia.
- proyectos de investigación sectorial del Plan Gallego de INCITE de la Xunta de Galicia.
- comisión de los Programas "Ramón y Cajal" y "Juan de la Cierva".
- proyectos de ANEP y de la Agencia Andaluza.
- Agencias europeas: Francia, Alemania, Chipre, Polonia y Portugal.

COMITÉ EDITORIAL

Miembro del comité editorial de *Anales de Química* de la RSEQ, a cargo del área de Química Biológica, Farmacéutica y Reconocimiento Molecular. Años 2009-11.

Editora Adjunta de *Anales de Química* de la RSEQ. Desde el año 2012.

REVISOR DE REVISTAS CIENTÍFICAS

Revisor habitual de revistas científicas internacionales con índice de impacto ISI (Chemistry-A Eur. J., Chem. Commun., Org. Biomol. Chem., ChemMedChem, MedChemComm., Mol. BioSys., PhysChemChemPhys, RSC-Advances, J. Comput.-Aided Mol. Des.).

PERTENENCIA Y PARTICIPACIÓN EN SOCIEDADES CIENTÍFICAS:

* Real Sociedad Española de Química RSEQ: Vocal de la Junta de Gobierno y Responsable de la página web y boletín. Desde 2012.

* Grupo Especializado de Química Biológica RSEQ: Co-fundadora. Secretaria (2011-14). Presidente (desde 2014).

* Chair de la Division of Chemistry for Life Sciences de Eu CheMS (desde 2017).

* American Chemical Society ACS, Sociedad Española de Química Terapéutica SEQT y Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular SEBBM.

Miembro de 28 Tribunales de Tesis Doctorales.

DOCENCIA:

DOCENCIA EN LA LICENCIATURA y GRADO EN FARMACIA

Cursos 2003/04, 2004/05, 2005/06, 2006/07, 2007/08, 2008/09, 2009/10, 2010/11, 2011/12, 2012/13, 2013/14:

* Licenciatura en Farmacia: asignatura de Química Farmacéutica, 3^{er} curso (prácticas y teoría).

Titulación Bilingüe en Farmacia: Organic Chemistry y Pharmaceutical Chemistry, 2^o y 3^{er} curso (prácticas y teoría).

* Grado en Farmacia y Grado Bilingüe: asignaturas de Química Farmacéutica I (3^{er} curso) y Química Farmacéutica II (4^o curso). Prácticas y teoría.

* Co-dirección de 14 Trabajos de Fin de Carrera, tres de ellos con Matrícula de Honor y tres Premios de Iniciación a la Investigación de la Universidad San Pablo CEU.

DOCENCIA EN GRADO EN BIOTECNOLOGÍA

Curso 2012/13, 2013/14:

Grado en Biotecnología: asignatura de Bioinformática (2^o curso). Prácticas y teoría.

DOCENCIA EN EL PROGRAMA OFICIAL DE DOCTORADO EN QUÍMICA MÉDICA

Cursos 2005/06, 2006/07, 2007/08, 2008/09, 2009/10, 2010/11. Desde 2013/14 (Máster en Descubrimiento de Fármacos).

Programa interuniversitario con Mención hacia la Excelencia (MEE2011-0415) impartido conjuntamente por las Universidades de Alcalá, Complutense y San Pablo CEU y por varios centros del CSIC.

Asignaturas de "Diseño de Fármacos" de "Resonancia Magnética Nuclear".

DOCENCIA EN EL MÁSTER EN QUÍMICA ORGÁNICA EXPERIMENTAL E INDUSTRIAL

CURSOS 2008/09, 2009/10, 2010/11, 2011/12, 2012/13, 2013/14, 2014/15 y 2016/17:

Programa interuniversitario (hasta año 2015) con Mención de Calidad impartido conjuntamente por las Universidades de Valencia, Politécnica de Valencia, Islas Baleares, Barcelona y Cardenal Herrera CEU.

Asignatura de "Química Orgánica Computacional".

DOCENCIA EN EL MÁSTER EN "Molecular & Cellular Integrative Biology"

CURSO 2016/17: Programa de Máster de la UIMP impartido en el CIB-CSIC.

Docencia en la Universidad de Valencia: Taller sobre Diseño de Fármacos. Asignatura 4^o Curso Grado en Farmacia "Nuevas estrategias para la obtención de fármacos". Años: 2012, 2014, 2015 y 2016.

INTERRUPCIÓN DE LA ACTIVIDAD INVESTIGADORA: La Dra. Martín Santamaría ha disfrutado de tres bajas por maternidad en los siguientes periodos: 25-08-2001 al 31-12-2001, 01-08-2003 al 28-02-2004 y 11-11-2005 al 31-03-2006.