

Parte A. INFORMACIÓN PERSONAL		Fecha del CV	7-noviembre-2024
Nombre y apellidos	Mercè Campillo Grau		
Número de identificación		Edad	
Códigos de investigador	Web of Science ID del investigador	C-6968-2008	
	SCOPUS Autor ID	7007077709	
	Identificación abierta de investigador y colaborador (ORCID)	0000-0002-6315-0212	

**A.1. Posición actual**

Nombre de la Universidad	Universidad Autónoma de Barcelona		
Departamento	Bioestadística/Facultad de Medicina		
Dirección y país	Edificio M, Campus Universitario. España		
Número de teléfono		Correo electrónico	<a href="mailto:mercè.campillo@ub.edu">mercè.campillo@ub.edu</a>
Posición actual	Catedrática Universidad	desde	17-1-2008
Palabras clave	Membrane proteins, G protein coupled receptors, drug design, molecular pharmacology, computational structural biology, biophysics, molecular modeling, bioinformatics, genetic and chromosomal analysis, pathogenia		

**A.2. Educación**

Título	Universidad	Año
Licenciada en Ciencias (Químicas)	Universidad Autónoma de Barcelona	1979
Doctorado	Universidad Autónoma de Barcelona	1987

**A.3. Artículos del JCR, h Índice**

Número de publicaciones	74
Suma del factor de impacto	244.6
Nº de citas	2694
índice h	33

**Parte B. RESUMEN DEL CV ABREVIADO**

Me licencié en Ciencias Químicas por la Universidad Autónoma de Barcelona (UAB) en 1982 y en 1987 me doctoré en Ciencias por la misma universidad. En 1990 obtuve una plaza estable en la UAB y actualmente soy Catedrática de esta desde 2008.

Mi investigación abarca diversos temas enfocados a la bioinformática traslacional utilizando herramientas computacionales, que van desde métodos estadísticos hasta análisis de genes, secuencias y proteínas y que vinculan conocimientos de los campos estadístico, químico y biológico, con los que he conseguido **6 tramos de investigación**. Mi experiencia acumulada (desde 2009) se resume con los siguientes 20 artículos publicados en 4 grandes bloques:

**1. Estructura y función de los receptores acoplados a proteínas G (GPCR)**

La combinación de la bioinformática estructural, la dinámica molecular y la extracción de la información contenida en las bases de datos de estructuras y secuencias, junto con los resultados experimentales de la mutagénesis dirigida, los ensayos funcionales y las técnicas biofísicas han permitido estudiar la estructura y la función de los GPCR. (MedChemComm 2011, 2, 160); el efecto de la conformación g- de Ser y Thr en la estructura de las hélices transmembrana (J.Struct.Biol. 2010, 169, 116); el estudio del mecanismo de activación de los receptores GPCR de la familia A (Mol.Pharmacol. 2010, 75, 982) y el papel de los residuos hidrofóbicos en la estructura y función de los GPCRs (Meth. Enzymol. 2013, 520, 99).

**2. Diseño de nuevos ligandos terapéuticos**

He utilizado técnicas de diseño de fármacos basadas en estructuras y ligandos para identificar ligandos dirigidos a la inhibición de la enzima isoprenilcisteína carboximetiltransferasa (ICMT) (J.Med.Chem. 2019, 62, 6035); el estudio de un inhibidor del receptor del factor de crecimiento como citotóxico en células de cáncer de mama HER2 positivas que interrumpe la interacción entre HER2 y Grb2 (J.Med.Chem. 2011, 54, 1096); sitamaquina como inhibidor de LMDR1, un transportador P-gp perteneciente a la familia ABC de Leishmania, (Antimicrob.Agents.Chemother. 2011, 55, 3838); inhibidores del receptor 5-HT6R (J.Med.Chem. 2010 53, 1357) y ligandos del 5-HT7R J.Med.Chem. 2009, 52, 2384).

**3. Proteínas de membrana**

Análisis poblacional de variantes naturales de receptores olfativos humanos (OR) así como creación de una aplicación interactiva para explorar los datos de mutaciones en OR humanos (BMC Biology 2021, 19, 10.1186/s12915-021-00962-0), creación de un modelo machine learning capaz de clasificar mutaciones como patógenas o no, mediante la creación de una base de datos (TMSNP) con información sobre mutaciones patógenas y no patógenas localizadas en la región transmembrana de proteínas de membrana (NAR Genomi.Bioinform, 2021, 3, 10.1093/nargab/lqab008), estudio de interacciones de residuos transmembrana (Bioinformatics 2019, 16, 2578); aplicación web para el análisis estadístico de secuencias de GPCRs (PlosOne 2018, 13, e0199843) y una matriz de sustitución para GPCRs (BMC Bioinformatics 2015, 16, 206).

**4. Análisis genético/cromosómico/patológico**

Abordé el estudio de factores pronósticos y de supervivencia en la esclerosis sistémica (Medicine 2015, 94, e1728; Clin.Exp.Rheumatol 2014; 32, 33; Semin.Arthritis.Rheu. 2012; 41, 789; Rheumathology 2010; 46, 1112); la inestabilidad cromosómica no meiótica en ovocitos inmaduros humanos (Eur.J.Hum.Genet 2014; 22, 202); el impacto de la hibridación genómica comparativa (CGH) en fibroblastos y blastómeros humanos individuales (Fertil.Steril. 2014; 101, 488); factores de riesgo y predictores del síndrome de Sjögren (Semin.Arthritis.Rheu. 2011; 41, 415); y detección de nuevos subgrupos de tumores de vejiga mediante análisis de CGH (Urology 2010; 75, 347).

El **resumen bibliométrico** de mi producción científica total es:

- 74 artículos (45 Q1 y 11 Q2) (1,8 publicaciones al año), que han recibido un total de 2.694 citas (36,4 por artículo) y 244,6 de índice de impacto acumulado (3,3 por artículo), lo que da lugar a un índice h de 33.

Además, soy autora de 8 publicaciones docentes y/o pedagógicas y 14 capítulos de libros. He dirigido o codirigido 4 tesis doctorales (2004, 2011, 2015, 2019).

He obtenido **financiación** de diversas organizaciones nacionales e internacionales, siendo investigadora principal de 9 de ellas:

- Ajustes de infraestructura de investigación, Dirección General de Universidades de la Generalitat de Catalunya, 1993PIR-00141, 1990, 18.030 €.
- Análisis energético y conformacional del plegamiento del ADN inducido por proteínas que insertan cadenas laterales en el surco menor, Dirección General de Enseñanza Superior e Investigación Científica, PB98-0907, 1999-2002, 36.060,73 €.
- Estudio teórico de los mecanismos de acción de las enzimas y modelización de proteínas, Dirección General de Universidades de la Generalitat de Catalunya, 1990, 18.030.36 €.
- Ayudas para la incorporación de técnicos de apoyo a la investigación, Universitat Autònoma de Barcelona, 2001-2003, 9.766 €.
- Becas de infraestructura de investigación, Dirección General de Universidades de la Generalitat de Catalunya, 2004PEIR10048, 2005, 42.500 €.
- Diseño, síntesis y desarrollo de nuevos agentes terapéuticos que interfieran en los mecanismos de transducción de señales celulares: Receptores de serotonina y cannabinoides y dominio SH2 de Grb2, Ministerio de Educación y Ciencia, SAF2004-07103-C02-02, 2004-2006, 97.600 €.
- Application of computer simulation in the identification of new therapeutic targets and drug design, Ministerio de Educación y Ciencia, SAF2007-67008-C02-02, 2007, 131.890 €.
- Reparto Fondos Bibliográficos PPI Universitat Autònoma de Barcelona, RFB2009-16, 2009-2010, 1.628,08 €
- Reparto Fondos Bibliográficos PPI Universitat Autònoma de Barcelona, RFB2010-16, 2010-2011, 1.727,34 €

y coinvestigadora de 35, siendo las conseguidas desde 2010:

- Métodos computacionales en el diseño de fármacos. Nuevas aproximaciones para modular receptores acoplados a proteínas G - (LABMEDCOMP), Ministerio de Ciencia e Innovación, SAF2010-22198-C02-02, 2011, 245.000 euros, IP L. Pardo.
- Red Temática de Investigación Cooperativa en Biomedicina Computacional, Instituto de Salud Carlos III, RD07/0067/0008-03, 90.004 €, 2011-2013, IP L. Pardo.
- Nuevas dianas terapéuticas, Ministerio de Economía y Competitividad, SAF2013-48271-C2-2-R, 2014, 205.000 €, IP L. Pardo.
- Grupos de investigación consolidados de calidad-SGR 2014, Dirección General de Universidades de la Generalitat de Catalunya, 2014, SGR0494, IP L. Pardo.
- Advances in Small Trials dEsign for Regulatory Innovation and eXcellence (ASTERIX), Comisión Europea, FP7-HEALTH-F5-2013-603160, 2014, 512.442 €, IP F. Torres.
- Métodos computacionales en el diseño de fármacos. New approaches for GPCR modulation, Ministerio de Ciencia e Innovación, SAF2010-22198-C02-02, 2011, 245.000 € + FPI, IP L. Pardo
- Red temática de investigación cooperativa en biomedicina computacional (COMBIOMED), Instituto de Salud Carlos III, RD07/0067/0008, 2008, 360.000 €, IP L. Pardo
- Modulación de receptores acoplados a proteínas g por ligandos y proteínas asociadas, Ministerio de Ciencia e Innovación, SAF2016-77830-R, 2016, 205.000 € + FPI, IP L. Pardo.
- Grupos de investigación consolidados de calidad-SGR 2017, Dirección General de Universidades de la Generalitat de Catalunya, 2017SGR1032, IP L. Pardo.
- Modulation of G-Protein Coupled Receptor Heteromers by Ligands and Proteins, Ministerio de Ciencia e Innovación, PID2019-109240RB-I00, 2020, 235.950 €, IP L. Pardo.

- Allosteric mechanism for the modulation of G protein coupled receptors related with pain and obesity, Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN), PID2022-140912OB-I00, 2023, 486.758,0 €, IP L. Pardo

- LIVERAIM: A Biomarker-Based Platform for Early Diagnosis of Chronic Liver Disease to Enable Personalized Therapy, Comisión Europea, JU-IHI-101132901-LIVERAIM, 2024, 721.444,0 €, IP F. Torres

También he obtenido financiación a través de 6 convenios con entidades privadas (Laboratorios Esteve, Adasa Sistemas S.A., Laboratorios Viñas, S.A., Vita-Invest, S.A. y Merck Farma y Química, S.A. - IGODA S.A.) por un importe total de 151.101 €.

A lo largo de mi carrera profesional he ocupado diversos cargos de gestión universitaria. En el curso 1992/93 fui secretaria de la Unidad Docente de Bellaterra (Facultad de Medicina, UAB). En 2009 y durante 3 años ocupé el cargo de directora de departamento de *Pediatría, Obstetricia i Ginecologia i Salut Pública* y posteriormente en 2012, también durante tres años, fui Vicedecana de Economía y Apoyo al Equipo Decanal, en la Facultad de Medicina. Entre 2016-2022, ocupé el cargo de Coordinadora de la Unidad de Bioestadística (Facultad de Medicina, UAB). He sido miembro de la Comisión Nacional de Acreditación del Profesorado Universitario (ANECA, 2012-2015 y 2021-2023) y actualmente soy miembro de la comisión de Ciencias de la Salud desde el pasado 2021.

## PUBLICACIONES DESDE 2000

### **The mutational landscape of human olfactory G protein-coupled receptors**

Jiménez, R. C., Casajuana-Martin, N., García-Recio, A., Alcántara, L., Pardo, L., Campillo, M. & González, A., 2021, *BMC Biology*. 19(1), doi: 10.1186/s12915-021-00962-0.

### **TMSNP: A web server to predict pathogenesis of missense mutations in the transmembrane region of membrane proteins**

García-Recio, A., Gómez-Tamayo, J. C., Reina, I., Campillo, M., Cordoní, A. & Olivella, M., 2021, *NAR Genomics and Bioinformatics*. 3(1), lqab008, doi: 10.1093/nargab/lqab008.

### **Inter-residue interactions in alpha-helical transmembrane proteins**

Mayol, E., Campillo, M., Cordoní, A. & Olivella, M., 2019, *Bioinformatics*. 35(15), p. 2578-2584, doi: 10.1093/bioinformatics/bty978.

### **A Potent Isoprenylcysteine Carboxylmethyltransferase (ICMT) Inhibitor Improves Survival in Ras-Driven Acute Myeloid Leukemia**

Marín-Ramos, N. I., Balabasquer, M., Ortega-Nogales, F. J., Torrecillas, I. R., Gil-Ordóñez, A., Marcos-Ramiro, B., Aguilar-Garrido, P., Cushman, I., Romero, A., Medrano, F. J., Gajate, C., Mollinedo, F., Philips, M. R., Campillo, M., Gallardo, M., Martín-Fontecha, M., López-Rodríguez, M. L. & Ortega-Gutiérrez, S., 2019, *Journal of Medicinal Chemistry*. 62(13), p. 6035-6046, doi: 10.1021/acs.jmedchem.9b00145.

### **GPCR-SAS: A web application for statistical analyses on G protein-coupled receptors sequences**

Gómez Tamayo, J. C., Olivella, M., Ríos, S., Hoogstraat, M., González, A., Mayol, E., Deupi, X., Campillo, M. & Cordoní, A., 2018, *PLoS ONE*. 13(7), e0199843, doi: 10.1371/journal.pone.0199843.

### **GPCRtm: An amino acid substitution matrix for the transmembrane region of class A G Protein-Coupled Receptors**

Ríos, S., Fernández, M. F., Caltabiano, G., Campillo, M., Pardo, L. & González, A., 2015, *BMC Bioinformatics*. 16:206, doi: 10.1186/s12859-015-0639-4.

### **Registry of the Spanish network for systemic sclerosis: Survival, prognostic factors, and causes of death**

Simeón-Aznar, C. P., Fonollosa-Plá, V., Tolosa-Vilella, C., Espinosa-Garriga, G., Campillo-Grau, M., Ramos-Casals, M., García-Hernández, F. J., Castillo-Palma, M. J., Sánchez-Román, J., Callejas-Rubio, J. L., Ortego-Centeno, N., Egurbide-Arberas, M. V., Trapiella-Martínez, L., Caminal-Montero, L., Sáez-Comet, L., Velilla-Marco, J., Camps-García, M. T., De Ramón-Garrido, E., Esteban-Marcos, E. M., Pallarés-Ferreres, L., & 6 others Navarrete-Navarrete, N., Vargas-Hitos, J. A., De La Torre, R. G., Salvador-Cervelló, G., Ríos-Blanco, J. J. & Vilardeell-Tarrés, M., 2015, *Medicine (United States)*. 94(43), e1728, doi: 10.1097/MD.0000000000001728.

### **Non-meiotic chromosome instability in human immature oocytes**

Daina, G., Ramos, L., Rius, M., Obradors, A., Del Rey, J., Giralt, M., Campillo, M., Velilla, E., Pujol, A., Martínez-Pasarell, O., Benet, J. & Navarro, J., 2014, *European Journal of Human Genetics*. 22(2), p. 202-207, doi: 10.1038/ejhg.2013.106.

### **Does the S phase have an impact on the accuracy of comparative genomic hybridization profiles in single fibroblasts and human blastomeres?**

Ramos, L., Del Rey, J., Daina, G., Martínez-Pasarell, O., Rius, M., Tuñón, D., Campillo, M., Benet, J. & Navarro, J., 2014, *Fertility and Sterility*. 101(2), p. 488-95, doi: 10.1016/j.fertnstert.2013.10.031.

### **The role of hydrophobic amino acids in the structure and function of the rhodopsin family of G protein-coupled receptors**

Caltabiano, G., Gonzalez, A., Cordoní, A., Campillo, M. & Pardo, L., 2013, *G Protein Coupled Receptor: Structure*. 1 ed. (DE): Elsevier Inc., Vol. 520. p. 99-115 16 p. (Methods in Enzymology), doi: 10.1016/B978-0-12-391861-1.00005-8.

**Registry of the Spanish Network for Systemic Sclerosis: Clinical Pattern According to Cutaneous Subsets and Immunological Status**

Simeón-Aznar, C. P., Fonollosa-Plá, V., Tolosa-Vilella, C., Espinosa-Garriga, G., Ramos-Casals, M., Campillo-Grau, M., García-Hernández, F. J., Castillo-Palma, M. J., Sánchez-Román, J., Callejas-Rubio, J. L., Ortego-Centeno, N., Egurbide-Arberas, M. V., Trapiella-Martínez, L., Gallego-Villalobos, M., Sáez-Comet, L., Velilla-Marco, J., Camps-García, M. T., de Ramón-Garrido, E., Esteban Marcos, E. M., Pallarés-Ferreres, L., Hidalgo-Tenorio, C., Sabio-Sánchez, J. M., Gómez-de la Torre, R., Salvador-Cervello, G., Rios-Blanco, J. J., Gil-Aguado, A. & Vilardell-Tarrés, M., 2012, *Seminars in Arthritis and Rheumatism*. 41(6), p. 789-800, doi: 10.1016/j.semarthrit.2011.10.004.

**Risk, Predictors, and Clinical Characteristics of Lymphoma Development in Primary Sjögren's Syndrome**

Solans-Laqué, R., López-Hernandez, A., Bosch-Gil, J. A., Palacios, A., Campillo, M. & Vilardell-Tarres, M., 1 Dec 2011, *Seminars in Arthritis and Rheumatism*. 41(3), p. 415-423, doi: 10.1016/j.semarthrit.2011.04.006.

**Sitamaquine overcomes ABC-mediated resistance to miltefosine and antimony in Leishmania**

Pérez-Victoria, J. M., Bavchvarov, B. I., Torrecillas, I. R., Martínez-García, M., López-Martín, C., Campillo, M., Castanys, S. & Gamarro, F., 2011, *Antimicrobial Agents and Chemotherapy*. 55(8), p. 3838-3844, doi: 10.1128/AAC.00065-11.

**The importance of solvation in the design of ligands targeting membrane proteins**

González, A., Murcia, M., Benhamú, B., Campillo, M., López-Rodríguez, M. L. & Pardo, L., 2011, *MedChemComm*. 2, p. 160-164, doi: 10.1039/c0md00258e.

**Development of non-peptide ligands of growth factor receptor-bound protein 2-src homology 2 domain using molecular modeling and NMR spectroscopy**

Orcajo-Rincón, Á. L., Ortega-Gutiérrez, S., Serrano, P., Torrecillas, I. R., Wüthrich, K., Campillo, M., Pardo, L., Viso, A., Benhamú, B. & López-Rodríguez, M. L., 2011, *Journal of Medicinal Chemistry*. 54(4), p. 1096-1100, doi: 10.1021/jm101478n.

**Age-related survival and clinical features in systemic sclerosis patients older or younger than 65 at diagnosis**

Pérez-Bocanegra, C., Solans-Laqué, R., Simeón-Aznar, C. P., Campillo, M., Fonollosa-Pla, V. & Vilardell-Tarrés, M., 2010, *Rheumatology*. 49(6), p. 1112-1117, doi: 10.1093/rheumatology/keq046.

**Benzimidazole derivatives as new serotonin 5-HT<sub>6</sub> receptor antagonists. Molecular mechanisms of receptor inactivation**

De La Fuente, T., Martín-Fontecha, M., Sallander, J., Benhamú, B., Campillo, M., Medina, R. A., Pellissier, L. P., Claeysen, S., Dumuis, A., Pardo, L. & López-Rodríguez, M. L., 2010, *Journal of Medicinal Chemistry*. 53(3), p. 1357-1369, doi: 10.1021/jm901672k.

**Comparative Genomic Hybridization Analysis Reveals New Different Subgroups in Early-stage Bladder Tumors**

Prat, E., del Rey, J., Ponsa, I., Nadal, M., Camps, J., Plaja, A., Campillo, M., Algaba, F., Gelabert, A. & Miró, R., 2010, *Urology*. 75(2), p. 347-355, doi: 10.1016/j.urology.2009.04.080.

**Influence of the g- conformation of Ser and Thr on the structure of transmembrane helices**

Deupi, X., Olivella, M., Sanz, A., Dölker, N., Campillo, M. & Pardo, L., 2010, *Journal of Structural Biology*. 169(1), p. 116-123, doi: 10.1016/j.jsb.2009.09.009.

**Synthesis of new serotonin 5-HT<sub>7</sub> receptor ligands. Determinants of 5-ht<sub>7</sub>/5-ht<sub>1a</sub>receptor selectivity**

Medina, R. A., Sallander, J., Benhamú, B., Porras, E., Campillo, M., Pardo, L. & López-Rodríguez, M. L., 2009, *Journal of Medicinal Chemistry*. 52(8), p. 2384-2392, doi: 10.1021/jm8014553.

**Conformational toggle switches implicated in basal constitutive and agonist-induced activated states of 5-hydroxytryptamine-4 receptors**

Pellissier, L. P., Sallander, J., Campillo, M., Gaven, F., Queffeuilou, E., Pillot, M., Dumuis, A., Claeysen, S., Bockaert, J. & Pardo, L., 2009, *Molecular Pharmacology*. 75(4), p. 982-990, doi: 10.1124/mol.108.053686.

**Genomic imbalances in urothelial cancer: Intratumor heterogeneity versus multifocality**

Prat, E., Del Rey, J., Camps, J., Ponsa, I., Lloreta, J., Egozcue, J., Gelabert, A., Campillo, M. & Miro, R., 2008, *Diagnostic Molecular Pathology*. 17(3), p. 134-140, doi: 10.1097/PDM.0b013e31815ce4e6.

**The specificity of binding of glycoprotein hormones to their receptors**

Caltabiano, G., Campillo, M., De Leener, A., Smits, G., Vassart, G., Costagliola, S. & Pardo, L., 2008, *Cellular and Molecular Life Sciences*. 65(16), p. 2484-2492, doi: 10.1007/s00018-008-8002-9.

**Analysis of replication protein A (RPA) in human spermatogenesis**

Oliver-Bonet, M., Campillo, M., Turek, P. J., Ko, E. & Martin, R. H., 2007, *Molecular Human Reproduction*. 13(12), p. 837-844, doi: 10.1093/molehr/gam076.

**Biological evaluation, structure-activity relationships, and three-dimensional quantitative structure-activity relationship studies of dihydro- $\beta$ -agarofuran sesquiterpenes as modulators of P-glycoprotein-dependent multidrug resistance**

Reyes, C. P., Muñoz-Martínez, F., Torrecillas, I. R., Mendoza, C. R., Gamarro, F., Bazzocchi, I. L., Núñez, M. J., Pardo, L., Castanys, S., Campillo, M. & Jiménez, I. A., 2007, *Journal of Medicinal Chemistry*. 50(20), p. 4808-4817, doi: 10.1021/jm070290v.

**Charge-charge and cation- $\pi$  interactions in ligand binding to G protein-coupled receptors**

Dölker, N., Deupi, X., Pardo, L. & Campillo, M., 2007, *Theoretical Chemistry Accounts*. 118, p. 579-588, <https://doi.org/10.1007/s00214-007-0341-3>

**Structural models of class A G protein-coupled receptors as a tool for drug design: Insights on transmembrane bundle plasticity**

Deupi, X., Dölker, N., López-Rodríguez, M. L., Campillo, M., Ballesteros, J. A. & Pardo, L., 2007, *Current Topics in Medicinal Chemistry*. 7(10), p. 991-998, doi: 10.2174/156802607780906799.

**Synthesis and pharmacophore modeling of naphthoquinone derivatives with cytotoxic activity in human promyelocytic leukemia HL-60 cell line**

Pérez-Sacau, E., Díaz-Peñate, R. G., Estévez-Braun, A., Ravelo, A. G., García-Castellano, J. M., Pardo, L. & Campillo, M., 2007, *Journal of Medicinal Chemistry*. 50(4), p. 696-706, doi: 10.1021/jm060849b.

**The role of internal water molecules in the structure and function of the rhodopsin family of G protein-coupled receptors**

Pardo, L., Deupi, X., Dölker, N., López-Rodríguez, M. L. & Campillo, M., 2007, *ChemBioChem*. 8(1), p. 19-24, doi: 10.1002/cbic.200600429.

**The importance of aneuploidy screening in reciprocal translocation carriers**

Pujol, A., Benet, J., Staessen, C., Van Assche, E., Campillo, M., Egozcue, J. & Navarro Ferreté, J., 2006, *Reproduction*. 131(6), p. 1025-1035, doi: 10.1530/rep.1.01063.

**On the mechanism of interaction of potent surmountable and insurmountable antagonists with the prostaglandin D2 receptor CRTH2**

Mathiesen, J. M., Christopoulos, A., Ulven, T., Royer, J. F., Campillo, M., Heinemann, A., Pardo, L. & Kostenis, E., 2006, *Molecular Pharmacology*. 69(4), p. 1441-1453, doi: 10.1124/mol.105.017681.

**Crossover frequency and synaptonemal complex length: Their variability and effects on human male meiosis**

Codina-Pascual, M., Campillo, M., Kraus, J., Speicher, M. R., Egozcue, J., Navarro, J. & Benet, J., 2006, *Molecular Human Reproduction*. 12(2), p. 123-133, doi: 10.1093/molehr/gal007.

**3-D structure of g protein-coupled receptors**

Pardo, L., Deupi, X., Govaerts, C. & Campillo, M., 2006, *Ligand Design for G Protein-coupled Receptors*. 1 ed. Nova York (US): WILEY-VCH Verlag GmbH & Co, Vol. 30. p. 183-203 20 p. (Methods and Principles in Medicinal Chemistry), doi: 10.1002/3527608249.ch10.

**The seventh transmembrane domains of the  $\delta$  and  $\kappa$  opioid receptors have different accessibility patterns and interhelical interactions**

Xu, W., Campillo, M., Pardo, L., De Riel, J. K. & Liu-Chen, L. Y., 2005, *Biochemistry*. 44(49), p. 16014-16025, doi: 10.1021/bi050938a.

**A three-dimensional pharmacophore model for 5-hydroxytryptamine<sub>6</sub> (5-HT<sub>6</sub>) receptor antagonists**

López-Rodríguez, M. L., Benhamú, B., De La Fuente, T., Sanz, A., Pardo, L. & Campillo, M., 2005, *Journal of Medicinal Chemistry*. 48(13), p. 4216-4219, doi: 10.1021/jm050247c.

**Synthesis and structure-activity relationships of a new model of arylpiperazines. 8. Computational simulation of ligand-receptor interaction of 5-HT<sub>1A</sub>R agonists with selectivity over  $\alpha_1$ -adrenoceptors**

López-Rodríguez, M. L., Morcillo, M. J., Fernández, E., Benhamú, B., Tejada, I., Ayala, D., Viso, A., Campillo, M., Pardo, L., Delgado, M., Manzanares, J. & Fuentes, J. A., 2005, *Journal of Medicinal Chemistry*. 48(7), p. 2548-2558, doi: 10.1021/jm048999e.

**Dihydro- $\beta$ -agarofuran sesquiterpenes: A new class of reversal agents of the multidrug resistance phenotype mediated by P-glycoprotein in the protozoan parasite Leishmania**

Cortés-Selva, F., Jiménez, I. A., Muñoz-Martínez, F., Campillo, M., Bazzocchi, I. L., Pardo, L., Ravelo, A. G., Castanys, S. & Gamarro, F., 2005, *Current Pharmaceutical Design*. 11(24), p. 3125-3159, doi: 10.2174/1381612054864920.

**Synapsis and meiotic recombination analyses: MLH1 focus in the XY pair as an indicator**

Codina-Pascual, M., Oliver-Bonet, M., Navarro, J., Campillo, M., García, F., Egozcue, S., Abad, C., Egozcue, J. & Benet, J., 2005, *Human Reproduction*. 20(8), p. 2133-2139, doi: 10.1093/humrep/dei023.

**First assessment of rapid prenatal diagnosis by QF-PCR in 18.000 consecutive pre and postnatal samples**

Pujol, A., Boiso, I., Benet, J., Veiga, A., Durban, M., Campillo, M., Egozcue, J. & Navarro, J., 2004, *Mol. Hum. Reprod.* 1, p. 1-1, ISSN: 1360-9947

**The use of a cell-cycle phase-marker may decrease the percentage of errors when using FISH in PGD**  
Pujol, A., Benet, J., Campillo, M., Codina-Pascual, M., Egozcue, J. & Navarro, J., 2004, *Cytogenetic and Genome Research*. 105(1), p. 29-35, doi: 10.1159/000078006.

**Diplogelasinospora grovesii IMI 171018, a new whole cell biocatalyst for the stereoselective reduction of ketones**

Campillo Grau, M. M., Pardo Carrasco, L., Carballeira, J. D., Álvarez, E. & Sinisterra, J. V., 2004, *Tetrahedron: asymmetry*. 15(6), p. 951-962, doi: 10.1016/j.tetasy.2004.01.034

**SAR Studies of Dihydro- $\beta$ -agarofuran Sesquiterpenes as Inhibitors of the Multidrug-Resistance Phenotype in a Leishmania tropica Line Overexpressing a P-Glycoprotein-Like Transporter**

Cortés-Selva, F., Campillo, M., Reyes, C. P., Jiménez, I. A., Castanys, S., Bazzocchi, I. L., Pardo, L., Gamarro, F. & Ravelo, A. G., 2004, *Journal of Medicinal Chemistry*. 47, p. 576-587

**Ser and Thr Residues Modulate the Conformation of Pro-Kinked Transmembrane  $\alpha$ -Helices**

Deupi, X., Olivella, M., Govaerts, C., Ballesteros, J. A., Campillo, M. & Pardo, L., 2004, *Biophysical Journal*. 86(1 pt 1), p. 105-115, doi: 10.1016/S0006-3495(04)74088-6.

**Optimization of the Pharmacophore Model for 5-HT<sub>7</sub>R Antagonism. Design and Synthesis of New Naphtholactam and Naphthosultam Derivatives**

López-Rodríguez, M. L., Porras, E., Morcillo, M. J., Benhamú, B., Soto, L. J., Lavandera, J. L., Ramos, J. A., Olivella, M., Campillo, M. & Pardo, L., 2003, *Journal of Medicinal Chemistry*. 46(26), p. 5638-5650, doi: 10.1021/jm030841r.

**Benzimidazole derivatives.4. The recognition of the voluminous substituent attached to the basic amino group of 5-HT<sub>4</sub> receptor antagonists**

López-Rodríguez, M. L., Benhamú, B., Murcia, M., Álvaro, E., Campillo, M. & Pardo, L., 2003, *Journal of Computer-Aided Molecular Design*. 17(8), p. 515-524, doi: 10.1023/b:jcam.0000004601.34056.c1.

**Glycoprotein hormone receptors: Determinants in leucine-rich repeats responsible for ligand specificity**

Smits, G., Campillo, M., Govaerts, C., Janssens, V., Richter, C., Vassart, G., Pardo, L. & Costagliola, S., 2003, *EMBO Journal*. 22(11), p. 2692-2703, doi: 10.1093/emboj/cdg260.

**Binding of proteins to the minor groove of DNA: What are the structural and energetic determinants for kinking a basepair step?**

Bosch, D., Campillo, M. & Pardo, L., 2003, *Journal of Computational Chemistry*. 24(6), p. 682-691, doi: 10.1002/jcc.10200.

**Analysis of nine chromosome probes in first polar bodies and metaphase II oocytes for the detection of aneuploidies**

Pujol, A., Boiso, I., Benet, J., Veiga, A., Durban, M., Campillo, M., Egozcue, J. & Navarro, J., 2003, *European Journal of Human Genetics*. 11(4) p. 325-336, doi: 10.1038/sj.ejhg.5200965.

**Back pain in the general population of Catalonia (Spain). Prevalence, characteristics and therapeutic behavior**

Bassols, A., Bosch, F., Campillo, M. & Baños, J. E., 2003, *Gaceta sanitaria / S.E.S.P.A.S.* 17(2), p. 97-107, doi: 10.1016/s0213-9111(03)71706-3.

**El dolor de espalda en la población catalana. Prevalencia, características y conducta terapéutica**

Bassols, A., Bosch, F., Campillo, M. & Baños, J. E., 2003, *Gaceta Sanitaria*. 17(2), p. 97-107, doi: 10.1016/s0213-9111(03)71706-3.

**Benzimidazole derivatives. 3. 3D-QSAR/CoMFA model and computational simulation for the recognition of 5-HT<sub>4</sub> receptor antagonists**

López-Rodríguez, M. L., Murcia, M., Benhamú, B., Viso, A., Campillo, M. & Pardo, L., 2002, *Journal of Medicinal Chemistry*. 45(22), p. 4806-4815, doi: 10.1021/jm020807x.

**5-HT<sub>4</sub> receptor antagonists. Structure-affinity relationships and ligand-receptor interactions**

Lopez-Rodríguez, M. L., Benhamu, B., Morcillo, M. J., Murcia, M., Viso, A., Campillo, M. & Pardo, L., 2002, *Current Topics in Medicinal Chemistry*. 2(6), p. 625-641, doi: 10.2174/1568026023393769.

**An epidemiologic study of headache and its treatment in the general population of Catalonia**

Bassols-Farrés, A., Bosch-Llonch, F., Campillo-Grau, M. & Baños-Diez, J. E., 2002, *Revista de Neurologia*. 34, 10, p. 901-908, doi: 10.33588/rn.3410.2001481.

**Computational model of the complex between GR113808 and the 5-HT<sub>4</sub> receptor guided by site-directed mutagenesis and the crystal structure of rhodopsin**

López-Rodríguez, M. L., Murcia, M., Benhamú, B., Olivella, M., Campillo, M. & Pardo, L., 2001, *Journal of Computer-Aided Molecular Design*. 15(11), p. 1025-1033, doi: 10.1023/a:1014895611874.

**3-D-QSAR/CoMFA and recognition models of benzimidazole derivatives at the 5-HT(4) receptor**

López-Rodríguez, M. L., Murcia, M., Benhamú, B., Viso, A., Campillo, M. & Pardo, L., 2001, *Bioorganic and Medicinal Chemistry Letters*. 11(21), p. 2807-2811, doi: 10.1016/s0960-894x(01)00517-0.

**Calibrating nucleic acids torsional energetics in force-field: Insights from model compounds**

Bosch, D., Foloppe, N., Pastor, N., Pardo, L. & Campillo, M., 2001, Journal of Molecular Structure: THEOCHEM. 537, p. 283-305, doi: 10.1016/S0166-1280(00)00685-0

**Separation between the digestive and the respiratory lumina during the human embryonic period:****Morphometric study along the tracheo-oesophageal septum**

Nebot-Cegarra, J., Fàbregas, P. J., Campillo, M. & Ricart, S., 2001, Journal of Anatomy. 198(pt 1), p. 117-124, doi: 10.1046/j.1469-7580.2001.19810117.x.

**Binding mechanisms of TATA box-binding proteins: DNA kinking is stabilized by specific hydrogen bonds**

Pardo, L., Campillo, M., Bosch, D., Pastor, N. & Weinstein, H., 2000, Biophysical Journal. 78(4), p. 1988-1996, doi: 10.1016/S0006-3495(00)76746-4.

**Molecular determinants of MAO selectivity in a series of indolylmethylamine derivatives: Biological activities, 3D-QSAR/CoMFA analysis, and computational simulation of ligand recognition**

Morón, J. A., Campillo, M., Perez, V., Unzeta, M. & Pardo, L., 2000, Journal of Medicinal Chemistry. 43(9), p. 1684-1691, doi: 10.1021/jm991164x.

**Readiness to change questionnaire: Reliability study of its spanish version**

Rodríguez-Martos, A., Rubio, G., Aubà, J., Santo-Domingo, J., Torralba, L. & Campillo, M., 2000, Alcohol and Alcoholism. 35(3), p. 270-275, doi: 10.1093/alcalc/35.3.270

**PROYECTOS CONCEDIDOS****Modulación de heterómeros de receptores acoplados a proteínas G por ligandos y proteínas**

Pardo Carrasco, L., Casajuana Martin, N., GOMEZ AUTET, M., Gonzalez Wong, A., Llinas del Torrent i Masachs, C., Caltabiano, G. & Campillo Grau, M. M.  
Ministerio de Ciencia e Innovación: 235.950,00 €  
1/01/20 → 31/12/22

**Laboratori de Medicina Computacional Laboratorio de Medicina Computacional Laboratorio de Medicina Computacional**

Pardo Carrasco, L., Caltabiano, G., Campillo Grau, M. M., Cordoní Montoya, A., González Wong, A., Guixa González, R., Jiménez Roses, M., Mayol Escuer, L. E., Pérez Benito, L., Rodríguez Torrecillas, I., Ríos Guillermo, J. & Torres, F.  
Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR)  
1/01/17 → 2/11/21

**Modulación de los receptores acoplados a proteínas g por ligandos y proteínas asociadas**

Pardo Carrasco, L., Caltabiano, G., Cordoní Montoya, A., González Wong, A., Campillo Grau, M. M. & Olivella García, M.  
Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO): €205.700,00 €  
30/12/16 → 30/06/20

**Sistema de cálculo intensivo y almacenamiento en red de alta velocidad para el desarrollo de fármacos.**

Pardo Carrasco, L., Zachmann, F. J., Caltabiano, G., Campillo Grau, M. M., Cordoní Montoya, A., Gómez Tamayo, J. C., González Wong, A., Matsoukas, M. T. & Torres, F.  
Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO): 41.249,31 €  
1/01/13 → 31/01/16

**Laboratori de Medicina Computacional Laboratorio de Medicina Computacional Laboratorio de Medicina Computacional**

Pardo Carrasco, L., Badía Sancho, A., Caltabiano, G., Campillo Grau, M. M., Gomez Tamayo, J. C., Gonzalez Wong, A., Matsoukas, M. T., Mayol Escuer, L. E., Perea López, M., Perez Benito, L. & Zachmann, F. J.  
Agència de Gestió d'Ajuts Universitaris i de Recerca (AGAUR)  
1/01/14 → 30/07/17

**Nuevas dianas y estrategias terapéuticas**

Pardo Carrasco, L., Caltabiano, G., Cordoní Montoya, A., Gómez Tamayo, J. C., González Wong, A., Matsoukas, M. T., Zachmann, F. J., Campillo Grau, M. M. & Olivella Garcia, M.  
Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO): 205.700,00 €  
1/01/14 → 31/03/17

**Avances en el diseño de pequeños ensayos para la innovación y la excelencia reglamentarias- ASTERIX**

Torres, F., Campillo Grau, M. M., Fontanet Sacristán, J. M., Morros Pedros, R. M., Pardo Carrasco, L., Pontes García, C., Ríos Guillermo, J., Torrent Farnell, J. & Vives Vilagut, R.  
Comisión Europea: 2.999.881,00 €  
1/10/13 → 30/11/17

**Red temática de investigación cooperativa en biomedicina computacional**

Pardo Carrasco, L., Caltabiano, G., Campillo Grau, M. M., Deupi Corral, X., González Wong, A., Opacic, E. J., Pérez Benito, L., Ríos Azuara, S. & Rodríguez Torrecillas, I.  
Instituto de Salud Carlos III: 90.004,31 €  
1/01/11 → 31/03/14

**Métodos computacionales en el diseño de fármacos. Nuevas aproximaciones para modular los receptores acoplados a proteínas G - (LABMEDCOMP)**

Pardo Carrasco, L., Caltabiano, G., Campillo Grau, M. M., Cases Amat, M., Cordoní Montoya, A., González Wong, A., Opacic, E. J., Perea López, M. & Rodríguez Torrecillas, I.  
Ministerio de Ciencia e Innovación: 242.000,00 €  
1/01/11 → 31/03/15

**Repertiment Fons Bibliogràfics PPI (2010)**

Campillo Grau, M. M.  
Universidad Autónoma de Barcelona (UAB): 1.727,34 €  
20/04/10 → 31/03/11

**Laboratorio de Medicina Computacional**

Pardo Carrasco, L., Opacic, E. J., Caltabiano, G., Campillo Grau, M. M., Cordoní Montoya, A., Deupi Corral, X., Perea López, M. & Rodríguez Torrecillas, I.  
Ministerio de Universidades, Investigación y Sociedad de la Información (DURSI): 1,00 €  
30/09/09 → 2/06/14

**Repertiment Fons Bibliogràfics PPI (2009)**

Campillo Grau, M. M.  
Universidad Autónoma de Barcelona (UAB): 1.621,08 €  
30/06/09 → 31/03/10

**Aplicación de la simulación computacional en la identificación de nuevas dianas terapéuticas y en el diseño de fármacos**

Campillo Grau, M. M., Caltabiano, G., Olivella García, M., Opacic, E. J. & Opacic, E. J.  
Ministerio de Educación y Ciencia: 131.890,00 €  
1/10/07 → 24/01/11

**Programa Juan de la Cierva: Xavier Deupí Corral**

Campillo Grau, M. M.  
Ministerio de Educación y Ciencia: 96.000,00 €  
1/01/07 → 31/12/09

**Grupo de Investigación Laboratorio de Medicina Computacional**

Pardo Carrasco, L., Campillo Grau, M. M., Deupi Corral, X., Doelker, N., Opacic, E. J. & Rodríguez Torrecillas, I.  
Universidad Autónoma de Barcelona (UAB)  
3/03/06 → 30/12/09

**Laboratorio de Medicina Computacional**

Pardo Carrasco, L., Deupi Corral, X., Opacic, E. J., Campillo Grau, M. M., Doelker, N. & Rodríguez Torrecillas, I.  
Ministerio de Universidades, Investigación y Sociedad de la Información (DURSI): 35.600,00 €  
19/10/05 → 31/01/09

**Disseny de nous agents terapèutics que interfereixen en mecanismes cel·lulars de transducció de senyals: Los receptores de serotonina y cannabinoides y el dominio SH2 de Grb2**

Campillo Grau, M. M., Olivella García, M., Sanz García, A. & Pardo Carrasco, L.  
Ministerio de Educación y Ciencia: 92.000,00 euros, Ministerio de Educación y Ciencia: 5.600,00 €  
13/12/04 → 1/03/08

**Farmacogenómica funcional de los receptores acoplados a proteínas G (GPCR)**

Pardo Carrasco, L. & Campillo Grau, M. M.  
Comisión Europea: 2.580.919,00 €  
1/01/04 → 1/01/07

**Aproximación bioinformática al estudio de la estructura y actividad de receptores acoplados a proteínas. Los receptores de tirotropina y quemoquinas**

Frey, G., Pardo Carrasco, L., Bosch Petit, D., Deupi Corral, X. & Campillo Grau, M. M.  
Ministerio de Ciencia y Tecnología: 74.750,00 €.  
1/12/02 → 31/03/06

**Receptores acoplados a proteínas P5/30-G: genómica funcional, farmacología molecular, estudios estructura-función**

Pardo Carrasco, L., Campillo Grau, M. M. & G. Vassart  
Comisión Europea: 100.000,00 €  
1/01/02 → 31/03/07

**Incorporación personal TSR: Joffre Heredia Rodrigo/ Marc Perea López**

Campillo Grau, M. M.  
Universidad Autónoma de Barcelona (UAB): 29.730,80 €  
1/01/02 → 31/03/05

**Anàlisi energètic i conformacional del doblament del DNA induït per proteïnes que inseren cadenes laterals en el solc menor**

Campillo Grau, M. M., Deupi Corral, X., Giraldo Arjonilla, J. & Pardo Carrasco, L.  
Dirección General de Enseñanza Superior e Investigación Científica: 36.060,70 €  
30/12/99 → 30/03/03



**El complejo beta-catenina-hTef-4 como blanco de la acción de péptidos antitumorales**

Duñach Masjuan, M., Campillo Grau, M. M., Doncel Eslava, S., García de Herreros Madueños, A. & Pardo Carrasco, L.  
Dirección General de Enseñanza Superior e Investigación Científica: 72.001,25 €  
30/12/99 → 31/03/02

**Modelización y simulación del mecanismo de transducción de señales asociado a proteínas G**

Pardo Carrasco, L., Bosch Petit, D., Campillo Grau, M. M. & Giraldo Arjonilla, J.  
Comisión Interministerial de Ciencia y Tecnología (CICYT): 36.962,24 €  
1/06/99 → 1/09/02

**Xarxa de Química Teòrica**

Aguilar Navarro, A., Bo Jané, C., Carbó Dorca, R., Duran Portas, M., Illas Riera, F., Lluch López, J. M., Novoa Vide, J. J., Olivella i Nello, S., Orozco López, M., Pérez González, J. J., Rubio Martínez, J., Sanz, F., Teixidó, J., Álvarez Reverter, S., Barea García, G., Carbo Martin, J. J., Cucurull Sánchez, L., García Expósito, M. E., García Viloca, M., González Blanco, O., Grabuleda Salart, F. X., Guallar Tasies, V., Marechal, J. D. P., Masgrau Fontanet, L., Muray Miquel, E., Pisano, L., Rodríguez García, C., Tomàs Amella, J., Torres Casas, L., Gelabert Peiri, R., Jordi Villà Freixa, J., Paz Marín, J. J., Bertran Rusca, J., Bosch Petit, D., Branchadell Gallo, V., Campillo Grau, M. M., Giraldo Arjonilla, J., González Lafont, M. D. A., Jaime Cardiel, C., Lledos Falco, A., Marquet Cortes, J., Maseras Cuni, F., Moreno Ferrer, M., Oliva Cuyas, A., Ortuño Mingarro, R. M., Pardo Carrasco, L., Sodupe Roure, M. & Ujaque Pérez, G.  
Comissionat per a Universitats i Recerca: 5.407,11 €  
1/11/98 → 31/01/01

**Modelización y simulación del mecanismo de transducción de señales asociadas a proteínas G.**

Pardo Carrasco, L., Bosch Petit, D., Campillo Grau, M. M. & Giraldo Arjonilla, J.  
Ministerio de Educación. Dirección General de Investigación Científica y Técnica (DGICYT): 24.040,48 €  
1/11/96 → 1/02/00

**Disseny assistit per ordinador d'agonistes i d'antagonistes selectius del receptor 5HT1a de la serotonina**

Pardo Carrasco, L., Campillo Grau, M. M. & Giraldo Arjonilla, J.  
Instituto de Salud Carlos III. Fondo de Investigación en Salud: 36.661,00 €  
1/01/94 → 31/03/97

**Modelización y simulación de la estructura y actividad de receptores de membrana**

Pardo Carrasco, L., Campillo Grau, M. M. & Giraldo Arjonilla, J.  
Ministerio de Educación. Dirección General de Investigación Científica y Técnica (DGICYT): 48.080,97 €  
31/05/93 → 31/03/97

**Modelización de receptores farmacológicos**

Pardo, L & Campillo Grau, M. M.  
Direcció General d' Universitats de la Generalitat de Catalunya: 21.035,42 €  
1/01/92 → 31/03/93

**Modelización de receptores farmacológicos**

Leonardo Pardo, M. Campillo, J. Giraldo, Pardo Carrasco, L., Campillo Grau, M. M. & Giraldo Arjonilla, J.  
Direcció General de Recerca de la Generalitat de Catalunya: 21.035,42 €  
1/01/92 → 1/09/92

**Trabajo Bioestadística-Medicina.**

Campillo Grau, M. M., Giraldo Arjonilla, J. & Pardo Carrasco, L.  
Universidad Autónoma de Barcelona (UAB): 25.242,51 €  
1/01/92 → 31/03/99

**Estudio teórico del efecto de la radiación sobre la estructura molecular del ADN**

Martín Mateo, M. L., Campillo Grau, M. M., Giraldo Arjonilla, J. & Pardo Carrasco, L.  
Universidad Autónoma de Barcelona (UAB): 8.414,17 €  
1/04/90 → 30/06/91

**Estudio teórico de mecanismos de acción de enzimas y modelización de proteínas**

Campillo Grau, M.  
Direcció General d' Universitats de la Generalitat de Catalunya: 18.030,36 €  
1/01/90 → 31/03/91