

CURRICULUM VITAE ABREVIADO (CVA)

AVISO IMPORTANTE – El *Curriculum Vitae* abreviado **no podrá exceder de 4 páginas**. Para rellenar correctamente este documento, lea detenidamente las instrucciones disponibles en la web de la convocatoria.

IMPORTANT – The *Curriculum Vitae* **cannot exceed 4 pages**. Instructions to fill this document are available in the website.

Fecha del CVA 16/06/2024

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre	Javier		
Apellidos	García Marín		
Sexo (*)	H	Fecha de nacimiento (dd/mm/yyyy)	04/01/1991
DNI, NIE, pasaporte	52902484T		
Dirección email	javier.garciamarn@uah.es	URL Web	
Open Researcher and Contributor ID (ORCID) (*)	0000-0002-5883-4783		

A.1. Situación profesional actual

Puesto	Profesor Ayudante Doctor		
Fecha inicio	01/03/2023		
Organismo/ Institución	Universidad de Alcalá		
Departamento/ Centro	Departamento de Química Orgánica y Química Inorgánica		
País	España	Teléfono	(34) 918854622
Palabras clave	Química Médica, Diseño de fármacos, Modelado molecular, Química computacional, Química Biológica		

A.2. Situación profesional anterior

Periodo	Puesto/ Institución/ País / Motivo interrupción
2022-2023	Investigador Postdoctoral /University of Bath/ United Kingdom
2020-2022	Investigador Postdoctoral / Centro de Investigaciones Biológicas Margarita Salas / España
2016 - 2020	Personal Docente e Investigador / Universidad de Alcalá / España
2015 - 2016	Ayudante de Investigación / Universidad de Alcalá / España

A.3. Formación Académica

Grado/Master/Tesis	Universidad/País	Año
Doctorado en Química Médica	Universidad de Alcalá / España	2020
Master Interuniversitario en Descubrimier Fármacos	Universidad Complutense de Madrid / España	2015
Licenciado en Farmacia Orientación Indu y Biotecnológica	Universidad Complutense de Madrid / España	2014

Parte B. RESUMEN DEL CV

Me gradué en Farmacia por la Universidad Complutense de Madrid en 2014 (Premio Extraordinario Rafael Fölch). Durante mis estudios de pregrado conseguí dos becas de para de introducción a la investigación en el Centro Nacional de Investigaciones Oncológicas (2012) y el Departamento de Química Farmacéutica de la UCM (2013), con proyectos centrados en química médica y biocatálisis respectivamente.

Al finalizar el Máster en Descubrimiento de Fármacos (2014), comencé mi doctorado en la Universidad de Alcalá con la ayuda de dos becas de doctorado competitivas: FPU-UAH (2016) y posteriormente un contrato FPU del Ministerio de Educación (2017), ambos bajo la supervisión del Prof. Juan J. Vaquero. Más tarde, conseguí una beca de movilidad para realizar una estancia de 3 meses en la Universidad de Bristol (Reino Unido), bajo la dirección



del Prof. Adrian Mulholland para aprender el uso de técnicas computacionales en el análisis y diseño de inhibidores de PTP1B.

Tras defender mi tesis 2020 (Sobresaliente Cum Laude, Premio Extraordinario de Doctorado), comencé como investigador postdoctoral en el Centro de Investigaciones Biológicas Margarita Salas bajo la supervisión de la Dra. Sonsoles Martín-Santamaria durante la pandemia de la COVID-19. Mi trabajo se centró en la búsqueda de nuevos antivirales contra el SARS-CoV-2 y su estudio computacional. En 2021, obtuve una Beca Postdoctoral Alfonso Martín Escudero, seguida de una Beca Postdoctoral Margarita Salas (Ministerio de Universidades) para comenzar mi segunda estancia postdoctoral (febrero de 2022) en Bath, Reino Unido, bajo la dirección de la Prof. Carmen Domene. Finalmente, en marzo de 2023, conseguí por concurso una plaza de Profesor Ayudante Doctor en la Universidad de Alcalá.

La gran mayoría de mi investigación ha sido publicada en revistas del campo de la química médica (ChemMedChem, Eur. J. Med Chem), siendo la mayoría de acceso abierto. Durante las distintas etapas de mi carrera he podido liderar y coordinar diversas líneas de investigación, lo que me permitió ser autor de correspondencia de algunas publicaciones (J. Bio. Str. Dyn 2020, ACS Med Chem Lett 2021, etc). He presentado los resultados de mi investigación en numerosos congresos, redes sociales y simposios nacionales e internacionales. En 2017 pude empezar una nueva línea de investigación, con el apoyo de mis directores, centrada en el estudio de ILK, gracias a un proyecto de la empresa BioSolveIT (Scientific Challenge 2017), la cual continué tras doctorarme. Parte de los resultados ya han sido publicados (ACS Med. Chem. Lett). Gracias a ésta soy coinventor de tres patentes (dos nacionales en 2021 y una internacional en 2022). Mis esfuerzos de investigación me valieron distintos galardones procedentes de la SEQT (2019 y 2021), RANF (2019, 2021) y BioSolveIT (Summer Challenge 2020) y otros reconocimientos.

Imparto clases de teoría y laboratorio en distintos Grados (Química, Farmacia, Biología Sanitaria, etc) de la UAH y he supervisado 6 TFMs (2016, 2017, 2018, 2019, 2021 y 2023), dentro del máster en Descubrimiento de Fármacos UCM-UAH-CEU. Por otro lado, mi interés por la ciencia y la sociedad me ha llevado a realizar divulgación en la Universidad de Alcalá (¡Química en Acción!', 2015-2020) y en el CIB-CSIC ('Semana de la Ciencia CSIC, 2020 y 2021). Además, en 2020 (Ponencias Divulgativas de AEBE) y 2021 (Semana Cultural Celánica UAH), participé, por invitación, en dos jornadas de divulgación.

Mi interés investigador radica en la interfaz de la química y la biología con énfasis en el estudio del reconocimiento molecular mediante técnicas computacionales aprendidas durante mi etapa postdoctoral y biofísicas. Gracias a ello, he conseguido mi primer proyecto como IP (PIUAH23/CC-022, 2023) y algunos artículos estudiando ILK y otros sistemas mediante métodos computacionales (J. Comp. Aid. Mol. Design 2022, J. Bio. Mol. Struc. Dyn. 2023). Además, soy revisor habitual en las revistas J. Bio. Struc. Dyn., J. Enzyme Inhib. Med. Chem. Int. J. Mol. Sci y Comput. Struct. Biotechnol. J y ChemMedChem.

Parte C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES

C.1. Publicaciones libros y revistas con “peer review” (CA: Autor de correspondencia, OA: Acceso abierto)

- 1. Artículo.** (CA) (6/9) F. Maqueda, L Valiño-Rivas, A Milián, S Gutiérrez-Hernández, JL Aceña, J Garcia-Marin, D Sánchez-Niño, JJ. Vaquero, A Ortiz. Identification and study of new NF- κ B-inducing kinase (NIK) ligands derived from the imidazolone scaffold. *Enviado*.
- 2. Capítulo de libro.** (3/4) E. Gomez-Rubio, A. Matamoros-Recio, J. Garcia-Marin, S. Santamaria; Computational Simulations of Glycan Recognition by Lectins and Other Carbohydrate Binding Proteins. *Comprehensive Computational Chemistry*. Edited by



- Professors Russell Boyd and Manuel Yanez. 2024. Elsevier. 4, pp 921-941. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-821978-2.00084-2>
3. **Artículo.** (CA) (2/2) E. Gomez-Rubio, J. Garcia-Marin; (2/2). Molecular dynamics simulations reveal the impact of NUTD15 variants in structural conformation and dynamics. 2023. J. Biomol. Struct. Dyn. 41, pp: 14812-1482. <https://doi.org/10.1080/07391102.2023.2187626>
 4. **Artículo.** (OA) (CA) (1/3) J. Garcia-Marin; D. Rodríguez-Puyol; Juan J. Vaquero. 2022. Insight into the mechanism of molecular recognition between human Integrin-Linked Kinase and Cpd22 and its implication at atomic level. 2022. Journal of Computer-Aided Molecular Design. 36, pp 575–589. <https://doi.org/10.1007/s10822-022-00466-1>.
 5. **Artículo.** (OA) (2/9) H. Lucio; J. Garcia-Marin; P. Sanchez-Alonso; J. C. Garcia-Soriano; Juan J. Vaquero; F. Gago; R. Alajarín; A. Jiménez-Ruiz. 2022. Pyridazino-pyrrolo-quinoxalium salts as highly potent and selective leishmanicidal agents targeting trypanothione reductase. European Journal of Medicinal Chemistry. Elsevier. pp.113915. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2021.113915>.
 6. **Artículo.** (CA) (OA) (1/8). J. Garcia-Marin; M. Griera; A. Matamoros-Recio, D. Rodriguez-Puyol. 2021. Tripeptides as Integrin-Linked Kinase Modulating Agents Based on a Protein–Protein Interaction with α -Parvin. ACS Medicinal Chemistry Letters: 12-11, pp.1656-1662. <https://doi.org/10.1021/acsmedchemlett.1c00183>.
 7. **Artículo.** (CA) (OA) (1/6) J. Garcia-Marin; M. Griera; R. Alajarin; M. Rodriguez-Puyol; D. Rodriguez-Puyol; Juan J. Vaquero. 2021. A computer-driven scaffold-hopping approach generating new PTP1B inhibitors from the pyrrolo[1,2-a]quinoxaline core ChemMedChem. Wiley. 16-18, 2895-2906. <https://doi.org/10.1002/cmdc.202100338>
 8. **Artículo.** (OA) (3/7) P. Sanchez-Alonso; M. Griera; J. Garcia-Marin; M. Rodriguez-Puyol; Juan J. Vaquero; D. Rodriguez-Puyol. 2021. Pyrrolo[1,2-a]quinoxal-5-inium Salts and 4,5-dihydropyrrolo[1,2-a]quinoxalines: Synthesis, Activity and Computational Docking for Protein Tyrosine Phosphatase 1B. Bioorganic & Medicinal Chemistry. Elsevier. 44-15, pp.116295. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2021.116295>.
 9. **Artículo.** (1/ 11) J. Garcia-Marin; M. Griera; P. Sanchez-Alonso;... D. Rodriguez-Puyol. 2020. Pyrrolo[1,2-a]quinoxalines: Insulin Mimetics that Exhibit Potent and Selective Inhibition against Protein Tyrosine Phosphatase 1B ChemMedChem. 15-1, pp.1-15. <https://doi.org/10.1002/cmdc.202000446>.
 10. **Artículo.** (CA) (1/1) J. Garcia-Marin. 2020. Computational Insight into the Selective Allosteric Inhibition for PTP1B versus TCPTP Journal of Biomolecular Structure and Dynamics. Taylor and Francis. 39-15, pp.5399-5410. <https://doi.org/10.1080/07391102.2020.1790421>.

C.2. Congresos (Últimos 5 años)

1. J Garcia-Marin; E Gomez-Rubio. Unveiling how point mutations affect NUDT15 dynamics with in silico approaches. SECUAH 2023. Universidad de Alcalá. 2023. España. Participativo - Ponencia oral (comunicación oral). Congreso.
2. J Garcia-Marin; C. Domene. Atomic Insights into the TRPM8 Activation by Small Molecules Through Computational Approaches. VI RSEQ Chemical Biology Group Meeting (ChemBioVI). Real Sociedad Española de Química. 2023. España. Participativo - Póster. Congreso.
3. J Garcia-Marin; S de Frutos; M Griera-Merino; M Rodríguez-Puyol; R Alajarín; D Rodríguez Puyol; JJ Vaquero. Functional mapping of the protein-protein interaction between integrin-linked kinase and alpha-parvin and its biological response. VI RSEQ Chemical Biology Group Meeting (ChemBioVI). Real Sociedad Española de Química. 2023. España. Participativo - Ponencia oral (comunicación oral). Congreso.



4. J. Garcia-Marin; A. Adhav; A. Marina; S. Martin-Santamaria. Computational Studies on SARS-CoV-2 Spike Protein Receptor Binding Domain: Drug Repurposing and Beyond (No Periódico). Molecular Simulation 2022 (MolSim 2022): Past, Present & Future. The Royal Society of Chemistry. 2022. Italia. Participativo - Póster. Congreso.

C.3. Proyectos o líneas de investigación en los que ha participado (Últimos 5 años)

1. **Proyecto.** BCV-2024-2-0037, Computational insights into the scaffolding activation of a pseudokinase by a small molecule. Javier García Marín. (Universidad de Alcalá). 01/07/2024-31/10/2024. 2016 kh, Marenostrium 5. **Investigador Principal.**
2. **Proyecto.** PIUAH23/CC-022, Nuevas estrategias terapéuticas en enfermedad renal crónica: Desarrollo de nuevos activadores de CPT1A. Javier García Marín. (Universidad de Alcalá). From 01/12/2023 to 30/11/2024. 6.500 €. **Investigador Principal.**
3. **Proyecto.** Nuevas estrategias diagnósticas y terapéuticas en enfermedad renal crónica (INNOREN-CM/P2022/BMD-7221). Santiago Lamas Peláez. (Universidad de Alcalá). 01/01/2023- 31/12/2026. 818.000 €. Miembro de equipo.
4. **Proyecto.** 'Computational approaches to block SARS-CoV-2 entry. BioSolveIT Scientific Challenge Summer 2020. (Centro de Investigaciones Biológicas). 01/06/2020- 30/05/2021. Investigador principal.
5. **Proyecto.** SGL2103050, Plataforma de Antivirales WP9 (Competitivo). Fondo Recuperación EU / Recovery and Resilience Facility. 2021-22. Khair. (Centro de Investigaciones Biológicas). Desde 01/07/2021. Miembro de equipo.

C.4. Participación en actividades de transferencia de tecnología/conocimiento

- 1 **Patente de invención.** Javier Garcia Marin; Ramón Alajarín Ferrández; Juan J. Vaquero López; Manuel Rofríguez Puyol; Sergio de Frutos García; Mercedes Griera Merino; Diego Rodríguez Puyol. Compuestos que se unen a la ILK y modulan la interacción ILK/alfa-parvina y la polimerización de actina España. 03/02/2022. Universidad de Alcalá. Número: PCT/ES2021/070571 (WO2022023612A1).
- 2 **Patente de invención.** Javier García Marín; Ramón Alajarín Ferrández; Juan José Vaquero López; Mercedes Griera Merino; Sergio de Frutos García; Manuel Rodríguez Puyol; Diego Rodríguez Puyol. ES2891987. COMPUESTOS MODULADORES DEL EFECTO DE LA QUINASA LIGADA A INTEGRINAS (ILK) SOBRE LA POLIMERIZACIÓN. DE ACTINA España. 01/02/2022. Universidad de Alcalá. Numero: ES2891987A1.
- 3 **Patente de invención.** Javier García Marín; Ramón Alajarín Ferrández; Juan José Vaquero López; Mercedes Griera Merino; Manuel Rodríguez Puyol; Sergio de Frutos García; Diego Rodríguez Puyol. ES2892025. COMPUESTOS QUE SE UNEN A LA ILK Y MODULAN LA INTERACCIÓN ILK/ALFA-PARVINA Y LA POLIMERIZACIÓN DE ACTINA. España. 14/07/2023. Universidad de Alcalá. Numero: ES2892025A1, ES2892025B2.

C.6. Premios y distinciones (Últimos 5 años)

1. Premio Extraordinario de Doctorado de la Universidad de Alcalá (2020-2021) 2022.
2. Paul Ehrlich Award 2021 Euro-PhD Network Award (2021).
3. Premio Asisa de la Real Academia Nacional de Farmacia (2021).
4. BioSolveIT Scientific Challenge Summer (2020)
5. Premio OTIMES FARMAPRAXIS de la Real Academia Nacional de Farmacia (2019)
6. Sociedad Española de Química Terapéutica, Premios 'ALMIRALL' (2019) y JANSSEN-CILAG (2021) para jóvenes investigadores.

C.7. Estancias en centros de I+D+i públicos o privados (Últimos 5 años)

1. University of Bath. Department of Chemistry. Reino Unido. Bath. 28/02/2022-28/02/2023. 1 año. Posdoctoral.
2. Centro de Investigaciones Biológicas. Departamento de Química Biológica y Estructural. España. 01/06/2020-25/02/2022. 1 año y 9 meses. Posdoctoral.