

**c v n** CURRÍCULUM VITAE NORMALIZADO



Generado desde: Editor CVN de FECYT  
Fecha del documento: 08/01/2025  
**v 1.4.3**  
f0bd6a8b70dbf709ffe2fec39743678e

Este fichero electrónico (PDF) contiene incrustada la tecnología CVN (CVN-XML). La tecnología CVN de este fichero permite exportar e importar los datos curriculares desde y hacia cualquier base de datos compatible. Listado de Bases de Datos adaptadas disponible en <http://cvn.fecyt.es/>



### Situación profesional actual

- 1 Entidad empleadora:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Departamento:** Química Orgánica y Química Inorgánica, Facultad de Farmacia  
**Categoría profesional:** Profesor Ayudante Doctor  
**Fecha de inicio:** 01/03/2023  
**Modalidad de contrato:** Contrato laboral temporal  
**Primaria (Cód. Unesco):** 230600 - Química orgánica  
**Secundaria (Cód. Unesco):** 239001 - Diseño. Síntesis y estudio nuevos fármacos
- 2 Entidad empleadora:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Departamento:** Department of Chemistry, University of Bath  
**Categoría profesional:** Investigador Postdoctoral Margarita Salas  
**Correo electrónico:** jgm54@bath.ac.uk  
**Fecha de inicio:** 01/03/2022  
**Modalidad de contrato:** Becario/a (pre o posdoctoral, otros) **Régimen de dedicación:** Tiempo completo  
**Funciones desempeñadas:** Primer año, investigador Postdoctoral en University of Bath, Reino Unido
- 3 Entidad empleadora:** Centro de Investigaciones Biológicas **Tipo de entidad:** Agencia Estatal  
**Categoría profesional:** Investigador Postdoctoral  
**Fecha de inicio:** 01/12/2020  
**Modalidad de contrato:** Contrato laboral indefinido  
**Primaria (Cód. Unesco):** 230226 - Bioquímica física; 239001 - Diseño. Síntesis y estudio nuevos fármacos  
**Funciones desempeñadas:** Modelado molecular de las interacciones de la proteína de la espícula del virus SARS-CoV-2 con la proteína ACE2. Cribado virtual de quimiotecas para la búsqueda de moléculas pequeñas con posible actividad antiviral. Diseño de peptidomiméticos de la ACE2 con potencial actividad antiviral por medio de técnicas de docking y simulaciones de dinámica molecular.
- 4 Entidad empleadora:** Centro de Investigaciones Biológicas **Tipo de entidad:** Agencia Estatal  
**Categoría profesional:** Personal Investigador  
**Fecha de inicio:** 01/06/2020  
**Modalidad de contrato:** Contrato laboral temporal **Régimen de dedicación:** Tiempo completo  
**Funciones desempeñadas:** Modelado molecular de las interacciones de la proteína de la espícula del virus SARS-CoV-2 con la proteína ACE2. Cribado virtual de quimiotecas para la búsqueda de moléculas pequeñas con posible actividad antiviral. Diseño de peptidomiméticos de la ACE2 con potencial actividad antiviral por medio de técnicas de docking y simulaciones de dinámica molecular.



| **Identificar palabras clave:** Química computacional; Biocomputación



## Formación académica recibida

### Titulación universitaria

Estudios de 1º y 2º ciclo, y antiguos ciclos (Licenciados, Diplomados, Ingenieros Superiores, Ingenieros Técnicos, Arquitectos)

**1 Titulación universitaria:** Titulado Superior

**Nombre del título:** Master Interuniversitario en Descubrimiento de Fármacos

**Ciudad entidad titulación:** Madrid, Comunidad de Madrid, España

**Entidad de titulación:** Universidad Complutense de Madrid **Tipo de entidad:** Universidad

**Fecha de titulación:** 31/07/2015

**Nota media del expediente:** Notable

**2 Titulación universitaria:** Titulado Superior

**Nombre del título:** Licenciado en Farmacia Orientación Industrial y Biotecnológica

**Ciudad entidad titulación:** Madrid, Comunidad de Madrid, España

**Entidad de titulación:** Universidad Complutense de Madrid **Tipo de entidad:** Universidad

**Fecha de titulación:** 31/07/2014

**Nota media del expediente:** Notable

**Premio:** Premio Fin de Carrera Fundación Rafael Fölch

### Doctorados

**Programa de doctorado:** Programa Oficial de Doctorado en Química Médica

**Entidad de titulación:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad

**Ciudad entidad titulación:** Alcalá de Henares, Comunidad de Madrid, España

**Fecha de titulación:** 23/09/2020

**Doctorado Europeo:** Sí

**Fecha de mención:** 23/10/2020

**Título de la tesis:** Estrategias en el tratamiento de la enfermedad renal crónica nuevos moduladores de PTP1B e ILK

**Director/a de tesis:** Juan José Vaquero López

**Codirector/a de tesis:** Ramón Alajarín Ferrández

**Calificación obtenida:** Sobresaliente (Cum Laude)

**Mención de calidad:** Sí

**Premio extraordinario doctor:** Sí

**Fecha de obtención:** 13/07/2022



## Formación especializada, continuada, técnica, profesionalizada, de reciclaje y actualización (distinta a la formación académica reglada y a la sanitaria)

- 1 Título de la formación:** Las enfermedades raras: minoritarias cada una de ellas pero afectan a millones de personas  
**Entidad de titulación:** Universidad Internacional Menéndez Pelayo  
**Fecha de finalización:** 05/07/2023  
**Tipo de entidad:** Universidad  
**Duración en horas:** 20 horas
- 2 Tipo de la formación:** Curso  
**Título de la formación:** Advanced Therapies  
**Entidad de titulación:** Universidad Internacional Menéndez Pelayo  
**Fecha de finalización:** 01/09/2022  
**Tipo de entidad:** Universidad  
**Duración en horas:** 25 horas
- 3 Título de la formación:** Python aplicado a la ingeniería y la investigación científica  
**Entidad de titulación:** Asociación Darwin Eventur  
**Fecha de finalización:** 20/08/2020  
**Duración en horas:** 100 horas
- 4 Título de la formación:** La pandemia COVID-19 una emergencia sanitaria: Evolución y perspectivas  
**Entidad de titulación:** FUNDACION GENERAL DE LA UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID  
**Fecha de finalización:** 18/05/2020  
**Duración en horas:** 5 horas
- 5 Título de la formación:** Publishing in the Chemical Sciences  
**Entidad de titulación:** Elsevier  
**Fecha de finalización:** 16/04/2020  
**Tipo de entidad:** Entidad Empresarial  
**Duración en horas:** 4 horas
- 6 Título de la formación:** Research data management  
**Entidad de titulación:** Elsevier  
**Fecha de finalización:** 16/04/2020  
**Tipo de entidad:** Entidad Empresarial  
**Duración en horas:** 4 horas
- 7 Título de la formación:** Almacenamiento y manipulación de productos químicos  
**Entidad de titulación:** CLINICA QUIRON  
**Fecha de finalización:** 18/11/2019  
**Duración en horas:** 2 horas
- 8 Tipo de la formación:** Curso  
**Título de la formación:** XVI Curso para Postgraduados sobre "Fundamentos Moleculares de la Medicina"  
**Entidad de titulación:** Real Academia Nacional de Medicina  
**Tipo de entidad:** Academia Nacional de Medicina  
**Responsable de la formación:** Enrique Blázquez Fernández  
**Fecha de finalización:** 23/05/2019  
**Duración en horas:** 12 horas
- 9 Título de la formación:** VI Summer School SEQT Medicinal Chemistry In Drug Discovery: The Pharma Perspective  
**Entidad de titulación:** Sociedad Española de Química Terapéutica  
**Fecha de finalización:** 21/06/2018  
**Duración en horas:** 15 horas



- 10 Tipo de la formación:** Curso  
**Título de la formación:** XV Curso para Postgraduados sobre "Fundamentos Moleculares de la Medicina"  
**Entidad de titulación:** Real Academia Nacional de Medicina      **Tipo de entidad:** Academia Nacional de Medicina  
**Responsable de la formación:** Enrique Blázquez Fernández  
**Fecha de finalización:** 24/05/2018      **Duración en horas:** 12 horas
- 11 Tipo de la formación:** Curso  
**Título de la formación:** IV Escuela de Biología Molecular y Celular Integrativa: Frontiers in Structural Biochemistry  
**Ciudad entidad titulación:** Santander, Cantabria, España  
**Entidad de titulación:** Universidad Internacional Menéndez Pelayo      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de finalización:** 01/09/2017      **Duración en horas:** 32 horas
- 12 Tipo de la formación:** Curso  
**Título de la formación:** Retrosynthesis of Drug Molecules (Programa de actividades de la Cátedra Hispano Británica "Reina Victoria Eugenia")  
**Ciudad entidad titulación:** Madrid, Comunidad de Madrid, España  
**Entidad de titulación:** Universidad Complutense de Madrid      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Responsable de la formación:** José Carlos Menéndez Ramos  
**Fecha de finalización:** 09/06/2017      **Duración en horas:** 25 horas

### Cursos y seminarios recibidos de perfeccionamiento, innovación y mejora docente, nuevas tecnologías, etc., cuyo objetivo sea la mejora de la docencia

- 1 Título del curso/seminario:** Impacto y uso de ChatGPT en el ámbito educativo  
**Objetivos del curso/seminario:** Mejora de la actividad docente  
**Entidad organizadora:** Universidad de Alcalá      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Duración en horas:** 3 horas  
**Fecha de inicio-fin:** 08/04/2024 - 08/04/2024
- 2 Título del curso/seminario:** La evaluación educativa en el mundo de la inteligencia artificial  
**Objetivos del curso/seminario:** Mejora de la actividad docente, formación en aplicaciones de inteligencia artificial para enseñanza  
**Entidad organizadora:** Universidad de Alcalá      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Duración en horas:** 3 horas  
**Fecha de inicio-fin:** 05/12/2023 - 05/12/2023
- 3 Título del curso/seminario:** XVIII Jornada de Coordinación Docente de la Facultad de Educación  
**Objetivos del curso/seminario:** Competencias tecnológicas profesionales y docentes  
**Entidad organizadora:** Universidad de Alcalá      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Educación  
**Duración en horas:** 5 horas  
**Fecha de inicio-fin:** 24/11/2023 - 24/11/2023
- 4 Título del curso/seminario:** Desarrollo, evaluación y difusión de proyectos de innovación: claves prácticas  
**Objetivos del curso/seminario:** Mejora de la actividad docente  
**Entidad organizadora:** Universidad Internacional de Andalucía      **Tipo de entidad:** Universidad



**Duración en horas:** 12 horas  
**Fecha de inicio-fin:** 27/04/2022 - 27/04/2022

**5 Título del curso/seminario:** Factores afectivos y emocionales que optimizan el aprendizaje online

**Objetivos del curso/seminario:** Mejora de la actividad docente

**Entidad organizadora:** Universidad Internacional de Andalucía **Tipo de entidad:** Universidad

**Duración en horas:** 12 horas

**Fecha de inicio-fin:** 20/09/2021 - 20/09/2021

**6 Título del curso/seminario:** Elaboración de proyectos de innovación

**Objetivos del curso/seminario:** Mejora de la formación docente

**Entidad organizadora:** Universidad Internacional de Andalucía **Tipo de entidad:** Universidad

**Duración en horas:** 12 horas

**Fecha de inicio-fin:** 01/07/2021 - 01/07/2021

**7 Título del curso/seminario:** Beyond Annotation: Learning through Close Reading of Media Texts

**Objetivos del curso/seminario:** Mejora de la actividad docente

**Entidad organizadora:** Universidad Internacional de Andalucía **Tipo de entidad:** Universidad

**Duración en horas:** 12 horas

**Fecha de inicio-fin:** 30/06/2021 - 30/06/2021

**8 Título del curso/seminario:** Rúbricas digitales: creación y posibilidades como herramientas de evaluación

**Objetivos del curso/seminario:** Mejora de la actividad docente

**Entidad organizadora:** Universidad Internacional de Andalucía **Tipo de entidad:** Universidad

**Duración en horas:** 12 horas

**Fecha de inicio-fin:** 20/12/2020 - 20/12/2020

**9 Título del curso/seminario:** Estrategias para el diseño de materiales y recursos de aprendizaje accesibles

**Objetivos del curso/seminario:** Mejora Docente

**Entidad organizadora:** Universidad Internacional de Andalucía **Tipo de entidad:** Universidad

**Duración en horas:** 12 horas

**Fecha de inicio-fin:** 09/12/2020 - 09/12/2020

**10 Título del curso/seminario:** Design Thinking en Educación

**Objetivos del curso/seminario:** Mejora Docente

**Entidad organizadora:** Universidad Internacional de Andalucía **Tipo de entidad:** Universidad

**Duración en horas:** 12 horas

**Fecha de finalización:** 04/10/2020



## Actividad docente

### Formación académica impartida

- 1** **Nombre de la asignatura/curso:** Enseñanza y aprendizaje de las ciencias de la naturaleza  
**Titulación universitaria:** Graduado en Educación Infantil  
**Fecha de inicio:** 18/09/2023 **Fecha de finalización:** 22/12/2023  
**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad
- 2** **Tipo de docencia:** Docencia oficial  
**Nombre de la asignatura/curso:** Química Combinatoria  
**Tipo de programa:** Máster oficial **Tipo de docencia:** Teórica presencial  
**Titulación universitaria:** Master Interuniversitario en Descubrimiento de Fármacos  
**Fecha de inicio:** 01/11/2023 **Fecha de finalización:** 10/11/2023  
**Tipo de horas/créditos ECTS:** Horas  
**Nº de horas/créditos ECTS:** 6  
**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Farmacia
- 3** **Tipo de docencia:** Docencia internacional  
**Nombre de la asignatura/curso:** Drug design: From classical to "in silico"  
**Tipo de programa:** Máster oficial **Tipo de docencia:** Teórica presencial  
**Titulación universitaria:** Master's Degree in Pharmacological Research  
**Curso que se imparte:** Primero  
**Fecha de finalización:** 28/02/2022  
**Tipo de horas/créditos ECTS:** Horas  
**Nº de horas/créditos ECTS:** 3  
**Entidad de realización:** Universidad Autónoma de Madrid **Tipo de entidad:** Universidad  
**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Medicina  
**Idioma de la asignatura:** Inglés
- 4** **Tipo de docencia:** Docencia oficial  
**Nombre de la asignatura/curso:** Química Farmacéutica  
**Tipo de programa:** Licenciatura **Tipo de docencia:** Prácticas de Laboratorio  
**Titulación universitaria:** Graduado o Graduada en Farmacia  
**Fecha de finalización:** 14/02/2020  
**Tipo de horas/créditos ECTS:** Horas  
**Nº de horas/créditos ECTS:** 54  
**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Farmacia
- 5** **Tipo de docencia:** Docencia oficial  
**Nombre de la asignatura/curso:** Química Orgánica  
**Tipo de programa:** Licenciatura **Tipo de docencia:** Prácticas de Laboratorio  
**Tipo de asignatura:** Troncal  
**Titulación universitaria:** Graduado o Graduada en Farmacia



**Curso que se imparte:** 2

**Fecha de finalización:** 28/01/2020

**Tipo de horas/créditos ECTS:** Horas

**Nº de horas/créditos ECTS:** 24

**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá

**Tipo de entidad:** Universidad

## Dirección de tesis doctorales y/o trabajos de fin de estudios

- 1 Título del trabajo:** Introducción y aprendizaje de conceptos básicos del magnetismo en infantil a través de juegos y experimentos  
**Alumno/a:** Victoria María Nistor Utiu  
**Calificación obtenida:** 8,6  
**Fecha de defensa:** 18/09/2024
- 2 Título del trabajo:** Búsqueda de nuevas moléculas pequeñas activadoras de la quinasa ligada a integrinas  
**Tipo de proyecto:** Trabajo fin de máster  
**Codirector/a tesis:** Jaime Mateos Gil  
**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Ana María Carozo Fernández  
**Calificación obtenida:** 9,2  
**Fecha de defensa:** 04/07/2024  
**Mención de calidad:** Sí **Fecha de obtención:** 11/07/2024
- 3 Título del trabajo:** La química a través de los colores: propuesta didáctica para el aula de infantil  
**Tipo de proyecto:** Trabajo fin de grado  
**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Ángela Saguar Hernaiz  
**Calificación obtenida:** 9  
**Fecha de defensa:** 03/07/2024  
**Fecha de obtención:** 03/07/2024
- 4 Título del trabajo:** Síntesis y estudio de nuevos moduladores de la quinasa ligada a integrinas  
**Tipo de proyecto:** Trabajo de Fin de Máster  
**Codirector/a tesis:** Jose Luis Aceña Bonilla  
**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá  
**Alumno/a:** Aarón Piculo Pérez  
**Calificación obtenida:** 8,6  
**Fecha de defensa:** 05/07/2023
- 5 Título del trabajo:** LDH MODULATORS: COMPUTATIONAL ANALYSIS OF THE BINDING MODE  
**Tipo de proyecto:** Trabajo Fin de Master  
**Entidad de realización:** Universidad San Pablo CEU **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Carmen Gómez García  
**Fecha de defensa:** 01/07/2021
- 6 Título del trabajo:** Síntesis de Moléculas Pequeñas no Peptídicas como Miméticos del Segmento Epítopo en la interacción Proteína-Proteína ILK-a-Parvina  
**Tipo de proyecto:** Trabajo de Fin de Máster  
**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Miriam Ramírez Rozalén



**Calificación obtenida:** Matrícula de Honor  
**Fecha de defensa:** 05/07/2019

- 7 Título del trabajo:** Diseño y síntesis de pequeños péptidos como inhibidores de la interacción ILK- $\alpha$ -parvina  
**Tipo de proyecto:** Trabajo de Fin de Máster  
**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Alejandra Matamoros Recio  
**Calificación obtenida:** Matrícula de Honor  
**Fecha de defensa:** 10/07/2018
- 8 Título del trabajo:** Síntesis y diseño de nuevos inhibidores alostéricos de PTP-1B  
**Tipo de proyecto:** Trabajo Fin de Máster  
**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Sandra Pereira Quevedo  
**Fecha de defensa:** 26/06/2017
- 9 Título del trabajo:** Compuestos bioactivos frente a la enfermedad renal: Exploración de la ciclación de indolilmetil derivados de TosMIC  
**Tipo de proyecto:** Trabajo Fin de Máster  
**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Alumno/a:** Andrea Gil Lalaguna  
**Fecha de defensa:** 28/06/2016

## Participación en proyectos de innovación docente

- 1 Título del proyecto:** RESIDUORG2: REcursos digitales para la mejora en la Segregación y gestión  
**Tipo de participación:** Coordinador  
**Nombre del investigador/a principal (IP):** Javier García Marín  
**Entidad financiadora:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Tipo de convocatoria:** Competitivo  
**Fecha de inicio-fin:** 01/09/2024 - 31/08/2025 **Duración:** 1 año
- 2 Título del proyecto:** Elaboración de un Manual de Nomenclatura en Química Orgánica  
**Tipo de participación:** Investigador principal  
**Tipo duración relación laboral:** Por tiempo determinado  
**Nombre del investigador/a principal (IP):** David Sucunza Sáez  
**Entidad financiadora:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2024 - 31/12/2024 **Duración:** 1 año
- 3 Título del proyecto:** RESIDUORG: REcursos digitales para la mejora en la Segregación y gestión Integral de residuos en los laboratorios Docentes Universitarios de química inorgánica y química ORGánica.  
**Tipo duración relación laboral:** Por tiempo determinado  
**Nombre del investigador/a principal (IP):** Rafael Castillo Romero  
**Entidad financiadora:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2024 - 31/12/2024 **Duración:** 1 año



## Participación en congresos con ponencias orientadas a la formación docente

- 1 Nombre del evento:** Formación crítica y reflexiva a través de la metodología Aprendizaje-Servicio: compromiso entre universidad y sociedad  
**Tipo de evento:** Jornada  
**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)  
**Autor de correspondencia:** No  
**Ciudad de celebración:** Alcalá de Henares,  
**Fecha de presentación:** 11/06/2024  
**Entidad organizadora:** Universidad de Alcalá                      **Tipo de entidad:** Universidad  
Elaboración de un Manual de Nomenclatura en Química Orgánica.
- 2 Nombre del evento:** Formación crítica y reflexiva a través de la metodología Aprendizaje-Servicio: compromiso entre universidad y sociedad  
**Tipo de evento:** Jornada  
**Tipo de participación:** Participativo - Póster  
**Autor de correspondencia:** No  
**Ciudad de celebración:** Alcalá de Henares,  
**Fecha de presentación:** 11/06/2024  
**Entidad organizadora:** Universidad de Alcalá                      **Tipo de entidad:** Universidad  
RESIDUORG: REcursos digitales para la mejora en la Segregación y gestión Integral de residuos en los laboratorios Docentes Universitarios de química inorgánica y química ORGánica.

## Otros méritos de docencia

Secretario del Tribunal de Tesis de Álvaro González Molina (UAH, 12/94/2024)  
Vocal del Tribunal de Tesis de Elena Gómez Rubio (UCM, 03/10/2022)

## Pluralidad, interdisciplinariedad y complejidad docente

He impartido docencia tanto teórica como práctica (laboratorios) en distintos grados del área STEM, Farmacia y Educación Infantil, con especial énfasis en la química orgánica y farmacéutica. Del mismo modo he sido tuor de varios TFGs del Grado en Educación Infantil (2) y del Grado en Farmacia (1). Además, colaboro regularmente en la docencia teórica en el Máster en Descubrimiento de Fármacos en el que he tenido la oportunidad de codirigir 7 TFMs. Así mismo también he impartido docencia en inglés en el Master of Pharmacology (UAM) en la asignatura de diseño de fármacos asistido por ordenador.



## Experiencia científica y tecnológica

### Actividad científica o tecnológica

#### Proyectos de I+D+i financiados en convocatorias competitivas de Administraciones o entidades públicas y privadas

- 1 Nombre del proyecto:** Aproximaciones químicas y computacionales para la modulación de la quinasa ligada a integrinas (MODILK)  
**Ámbito geográfico:** Autonómica  
**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Alcalá de Henares, España  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Javier García Marín  
**Nº de investigadores/as:** 5  
**Entidad/es financiadora/s:**  
Comunidad de Madrid      **Tipo de entidad:** Conserjería de Educación Ciencia y Universidades

**Cód. según financiadora:** CM/DEMG/2024- 005  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2025 - 31/12/2027      **Duración:** 2 años  
**Cuantía total:** 15.000 €
- 2 Nombre del proyecto:** RICORS2040-Renal  
**Ámbito geográfico:** Nacional  
**Grado de contribución:** Investigador/a  
**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Alberto Ortiz Arduan; Manuel Ángel Fernández Rodríguez  
**Nº de investigadores/as:** 8  
**Tipo de participación:** Miembro de equipo  
**Nombre del programa:** Redes de Investigación Cooperativa Orientadas a Resultados en Salud (RICORS)  
**Cód. según financiadora:** RD24/0004/0008  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2025 - 31/12/2027      **Duración:** 3 años  
**Cuantía total:** 3.735.028 €      **Cuantía subproyecto:** 138.303 €
- 3 Nombre del proyecto:** Nuevas estrategias diagnósticas y terapéuticas en enfermedad renal crónica (INNOREN-CM)  
**Ámbito geográfico:** Autonómica  
**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Alcalá de Henares, España  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Santiago Lamas Peláez  
**Tipo de participación:** Miembro de equipo  
**Nombre del programa:** Programas de Investigación en Biomedicina  
**Cód. según financiadora:** INNOREN-CM/P2022/BMD-7221  
**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2023 - 31/12/2026  
**Cuantía total:** 818.000 €      **Cuantía subproyecto:** 141.624,8 €  
**Régimen de dedicación:** Tiempo completo



- 4** **Nombre del proyecto:** Computational insights into the scaffolding activation of a pseudokinase by a small molecule (Ampliación) (600 CPU hours, BSC/MN5-GPP)  
**Modalidad de proyecto:** De investigación y desarrollo incluida traslacional **Ámbito geográfico:** Nacional  
**Grado de contribución:** Coordinador del proyecto total, red o consorcio  
**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Alcalá de Henares, España  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Javier Garcia Marin; Sergio de Frutos García; Marta Durán Martínez  
**Nº de investigadores/as:** 3  
**Tipo de participación:** Investigador principal  
**Nombre del programa:** Red Española de Supercomputación  
**Cód. según financiadora:** BCV-2024-3-0010  
**Fecha de inicio-fin:** 01/11/2024 - 28/02/2025  
**Cuantía total:** 811 €
- 5** **Nombre del proyecto:** Nuevas estrategias terapéuticas en enfermedad renal crónica: Desarrollo de nuevos activadores de CPT1A y moduladores de ILK (PIUAH23/CC-022)  
**Ámbito geográfico:** Autonómica  
**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Alcalá de Henares, España  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Javier García Marín  
**Nº de investigadores/as:** 8  
**Tipo de participación:** Investigador principal  
**Cód. según financiadora:** PIUAH23/CC-022  
**Fecha de inicio-fin:** 01/12/2023 - 30/11/2024 **Duración:** 1 año  
**Cuantía total:** 6.500 €
- 6** **Nombre del proyecto:** Computational insights into the scaffolding activation of a pseudokinase by a small molecule (2016 kh CPU hours, BSC/MN5-GPP)  
**Modalidad de proyecto:** De investigación y desarrollo incluida traslacional **Ámbito geográfico:** Nacional  
**Grado de contribución:** Coordinador del proyecto total, red o consorcio  
**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad realización:** Alcalá de Henares, España  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Javier Garcia Marin; Sergio de Frutos García; Marta Durán Martínez  
**Nº de investigadores/as:** 3  
**Tipo de participación:** Investigador principal  
**Nombre del programa:** Red Española de Supercomputación  
**Cód. según financiadora:** BCV-2024-2-0037  
**Fecha de inicio-fin:** 01/07/2024 - 31/10/2024  
**Cuantía total:** 2.725 €
- 7** **Nombre del proyecto:** 'Computational approaches to block SARS-CoV-2 entry  
**Ámbito geográfico:** Unión Europea  
**Entidad de realización:** Centro de Investigaciones Biológicas **Tipo de entidad:** Agencia Estatal  
**Ciudad entidad realización:** Madrid, Comunidad de Madrid, España  
**Nº de investigadores/as:** 1  
**Tipo de participación:** Investigador principal

**Nombre del programa:** BioSolvelt Scientific Challenge Summer 2020**Fecha de inicio-fin:** 01/06/2020 - 30/05/2021**Duración:** 12 meses**8 Nombre del proyecto:** Multidisciplinary approach to blocking SARS-CoV-2 entry through antivirals and Decoy-ACE2 fragments**Modalidad de proyecto:** De investigación y desarrollo incluida traslacional**Ámbito geográfico:** Nacional**Grado de contribución:** Investigador/a**Entidad de realización:** Centro de Investigaciones Biológicas**Tipo de entidad:** Agencia Estatal**Ciudad entidad realización:** CSIC,**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** M<sup>a</sup> Jesus Pérez Pérez**Tipo de participación:** Miembro de equipo**Nombre del programa:** CSIC COVID-19**Cód. según financiadora:** CSIC-COV19-082**Fecha de inicio-fin:** 27/04/2020 - 27/04/2021**Duración:** 6 meses**Cuantía total:** 157.000 €**Cuantía subproyecto:** 250.000 €**Régimen de dedicación:** Tiempo completo**9 Nombre del proyecto:** Multidisciplinary approach to blocking SARS-CoV-2 entry through antivirals and Decoy-ACE2 fragments**Modalidad de proyecto:** De investigación y desarrollo incluida traslacional**Ámbito geográfico:** Nacional**Grado de contribución:** Investigador/a**Entidad de realización:** Centro de Investigaciones Biológicas**Tipo de entidad:** Agencia Estatal**Ciudad entidad realización:** Madrid,**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Ron Geller**Tipo de participación:** Miembro de equipo**Nombre del programa:** Fondo SUPERA Santander**Cód. según financiadora:** BlockAce**Fecha de inicio-fin:** 27/04/2020 - 27/04/2021**Duración:** 12 meses**Cuantía total:** 150.000 €**10 Nombre del proyecto:** Identification of inhibitors of SARS-CoV-2 S protein**Ámbito geográfico:** Unión Europea**Entidad de realización:** Centro de Investigaciones Biológicas**Tipo de entidad:** Agencia Estatal**Ciudad entidad realización:** Madrid,**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Sonsoles Martín Santamaría**Nº de investigadores/as:** 3**Tipo de participación:** Miembro de equipo**Nombre del programa:** PRACE COVID-19-26**Cód. según financiadora:** PRACE COVID-19-26**Fecha de inicio-fin:** 27/04/2020 - 26/04/2020**11 Nombre del proyecto:** Plataforma de Antivirales WP9 (Competitivo)**Modalidad de proyecto:** De investigación y desarrollo incluida traslacional**Ámbito geográfico:** Nacional**Grado de contribución:** Investigador/a**Entidad de realización:** Centro de Investigaciones Biológicas**Tipo de entidad:** Agencia Estatal



**Ciudad entidad realización:** Madrid,  
**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Khiar; Garaigorta  
**Tipo de participación:** Miembro de equipo  
**Nombre del programa:** Fondo Recuperación EU / Recovery and Resilience Facility. 2021-22  
**Cód. según financiadora:** SGL2103050  
**Fecha de inicio:** 01/07/2021 **Duración:** 18 meses  
**Régimen de dedicación:** Tiempo completo

## Resultados

### Propiedad industrial e intelectual

- Título propiedad industrial registrada:** COMPUESTOS MODULADORES DEL EFECTO DE LA QUINASA LIGADA A INTEGRINAS (ILK) SOBRE LA POLIMERIZACIÓN DE ACTINA  
**Tipo de propiedad industrial:** Patente de invención **Derechos de autor:** Sí  
**Inventores/autores/obtenedores:** 1; Javier García Marín; Ramón Alajarín Ferrández; Juan José Vaquero López; Mercedes Griera Merino; Sergio de Frutos García; Manuel Rodríguez Puyol; Diego Rodríguez Puyol  
**Entidad titular de derechos:** Universidad de Alcalá  
**Nº de solicitud:** P202030776  
**País de inscripción:** España, Comunidad de Madrid  
**Fecha de registro:** 27/07/2020  
**Fecha de concesión:** 14/06/2022  
**Nº de patente:** ES2891987  
**Patente española:** Sí **Patente UE:** No  
**Patente internacional no UE:** Sí **Patente PCT:** No  
**Licencias:** No  
**Explotación, en exclusiva:** No
- Título propiedad industrial registrada:** Compuestos que se unen a la ILK y modulan la interacción ILK/alfa-parvina y la polimerización de actina  
**Tipo de propiedad industrial:** Patente de invención **Derechos de autor:** Sí  
**Inventores/autores/obtenedores:** Javier Garcia Marin; Ramón Alajarín Ferrández; Juan J. Vaquero López; Manuel Rofríguez Puyol; Sergio de Frutos García; Mercedes Griera Merino; Diego Rodríguez Puyol  
**Entidad titular de derechos:** Universidad de Alcalá  
**Nº de solicitud:** PCT/ES2021/070571  
**País de inscripción:** España  
**Fecha de registro:** 27/07/2021  
**Fecha de concesión:** 03/02/2022  
**Nº de patente:** PCT/ES2021/070571  
**Patente UE:** Sí  
**Patente PCT:** Sí  
**Licencias:** No  
**Explotación, en exclusiva:** Sí  
**Generada empresa innovadora:** No
- Título propiedad industrial registrada:** COMPUESTOS QUE SE UNEN A LA ILK Y MODULAN LA INTERACCIÓN ILK/ALFA-PARVINA Y LA POLIMERIZACIÓN DE ACTINA  
**Tipo de propiedad industrial:** Patente de invención **Derechos de autor:** Sí  
**Inventores/autores/obtenedores:** Javier García Marín; Ramón Alajarín Ferrández; Juan José Vaquero López; Mercedes Griera Merino; Manuel Rodríguez Puyol; Sergio de Frutos García; Diego Rodríguez Puyol



**Entidad titular de derechos:** Universidad de Alcalá

**Nº de solicitud:** P202030775

**País de inscripción:** España, Comunidad de Madrid

**Fecha de registro:** 27/07/2020

**Fecha de concesión:** 01/02/2022

**Nº de patente:** ES2892025

**Patente española:** Sí

**Patente UE:** No

**Patente internacional no UE:** No

**Patente PCT:** No

**Licencias:** No

**Explotación, en exclusiva:** No

## Actividades científicas y tecnológicas

### Producción científica

#### Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1** Javier Garcia Marin; Mercedes Griera Merino; Alejandra Matamoros Recio; Sergio de Frutos; Manuel Rodríguez Puyol; Ramón Alajarín Ferrández; Juan J Vaquero Lopez; Diego Rodríguez Puyol. Tripeptides as Integrin-Linked Kinase Modulating Agents Based on a Protein-Protein Interaction with  $\alpha$ -Parvin. ACS Medicinal Chemistry Letters. 12 - 11, pp. 1656 - 1662. 15/07/2021. ISSN 1948-5875

**DOI:** 10.1021/acsmchemlett.1c00183

**Colección:** Medicinal Chemistry in Portugal and Spain: A Strong Iberian Alliance

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Posición de firma:** 1

**Nº total de autores:** 8

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 4.345

**Posición de publicación:** 7

**Publicación relevante:** Sí

**Tipo de soporte:** Revista

**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

**Autor de correspondencia:** Sí

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MEDICINAL

**Revista dentro del 25%:** Sí

**Num. revistas en cat.:** 80
- 2** Javier Garcia Marin; Mercedes Griera Merino; Ramón Alajarín Ferrández; Manuel Rodríguez Puyol; Diego Rodríguez Puyol; Juan José Vaquero López. A computer-driven scaffold-hopping approach generating new PTP1B inhibitors from the pyrrolo[1,2-a]quinoxaline core. ChemMedChem. 16 - 18, pp. 2895 - 2906. Wiley, 17/06/2021. ISSN 1860-7187

**DOI:** 10.1002/cmdc.202100338

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Posición de firma:** 1

**Nº total de autores:** 6

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 3.466

**Posición de publicación:** 21

**Publicación relevante:** Sí

**Tipo de soporte:** Revista

**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

**Autor de correspondencia:** Sí

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MEDICINAL

**Revista dentro del 25%:** No

**Num. revistas en cat.:** 70



- 3** Francisco Maqueda Zelaya; Lara Valiño Rivas; Ana Milián; Sara Gutiérrez Hernández; Jose Luis Aceña Bonilla; Javier García Marín; M<sup>a</sup> Dolores Sánchez Niño; Juan José Vaquero López; Alberto Ortiz Arduan. Identification and study of new NF- $\kappa$ B-inducing kinase ligands derived from the imidazolone scaffold. *Archiv der Pharmazie*. 358 - e2400614, pp. 1 - 16. Wiley, 27/11/2024.

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Posición de firma:** 7

**Nº total de autores:** 9

**Tipo de soporte:** Revista

**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

**Autor de correspondencia:** Sí

- 4** Elena Gomez Rubio; Javier Garcia Marin. Molecular dynamics simulations reveal the impact of NUDT15 R139C and R139H variants in structural conformation and dynamics. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*. Taylor & Francis, 12/03/2023. Disponible en Internet en: <<https://doi.org/10.1080/07391102.2023.2187626>>. ISSN 1538-0254

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Posición de firma:** 2

**Nº total de autores:** 2

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 5,235

**Posición de publicación:** 15

**Tipo de soporte:** Revista

**Autor de correspondencia:** Sí

**Categoría:** Biophysics

**Revista dentro del 25%:** Sí

**Num. revistas en cat.:** 72

- 5** Javier García Marín; Juan José Vaquero López; Diego Rodríguez Puyol. Insight into the mechanism of molecular recognition between human Integrin-Linked Kinase and Cpd22 and its implication at atomic level. *Journal of computer-aided molecular design*. 36, pp. 575 - 589. 23/07/2022. ISSN 1573-4951

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Posición de firma:** 1

**Nº total de autores:** 3

**Autor de correspondencia:** Sí

- 6** Héctor Lucio Toro; Javier García Marín; Patricia Sánchez Alonso; Juan Carlos García Soriano; Juan J Vaquero López; Federico Gago; Ramón Alajarín; Antonio Jiménez-Ruiz. Pyridazino-pyrrolo-quinioxalium salts as highly potent and selective leishmanicidal agents targeting trypanothione reductase. *European Journal of Medicinal Chemistry*. pp. 113915. Elsevier, 05/01/2022. ISSN 0223-5234

**DOI:** 10.1016/j.ejmech.2021.113915

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Posición de firma:** 1

**Nº total de autores:** 9

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 6.514

**Posición de publicación:** 5

**Tipo de soporte:** Revista

**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

**Autor de correspondencia:** No

**Categoría:** Medicinal chemistry

**Revista dentro del 25%:** Sí

**Num. revistas en cat.:** 63

- 7** Elena Gómez-Rubio; Javier Garcia-Marin. Molecular dynamics simulations reveal the impact of NUTD15 variants in structural conformation and dynamics. *bioRxiv*. Cold Spring Harbor Laboratory, 2022. Disponible en Internet en: <<https://www.biorxiv.org/content/early/2022/10/23/2022.10.23.513377>>. ISSN 2692-8205

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Posición de firma:** 2

**Nº total de autores:** 2

**Tipo de soporte:** Revista

**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

**Autor de correspondencia:** Sí

- 8** Sánchez Sanchez Alonso; Mercedes Griera Merino; Javier Garcia Marin; Manuel Rodríguez Puyol; Juan J. Vaquero López; Diego Rodríguez Puyol. 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*. 44 - 15, pp. 116295. Elsevier, 07/2021. ISSN 1464-3391

**DOI:** 10.1016/j.bmc.2021.116295



**Tipo de producción:** Artículo científico  
**Posición de firma:** 3

**Nº total de autores:** 7

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 3.641

**Posición de publicación:** 13

**Tipo de soporte:** Revista

**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

**Autor de correspondencia:** No

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, ORGANIC

**Revista dentro del 25%:** Sí

**Num. revistas en cat.:** 58

- 9** Javier Garcia Marin; Mercedes Griera; Patricia Sánchez Alonso; Bruno di Geronimo Quintero; Francisco Mendicuti; Manuel Rodríguez Puyol; Ramón Alajarín Ferrández; Beatriz de Pascual Teresa; Juan José Vaquero López; Diego Rodríguez Puyol. Pyrrolo[1,2-a]quinoxalines: Insulin Mimetics that Exhibit Potent and Selective Inhibition against Protein Tyrosine Phosphatase 1B. ChemMedChem. 15 - 1, pp. 1 - 15. 10/09/2020. ISSN 1860-7187

**DOI:** 10.1002/cmcd.202000446

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Posición de firma:** 1

**Nº total de autores:** 11

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 3.466

**Tipo de soporte:** Revista

**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

**Autor de correspondencia:** No

**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MEDICINAL

- 10** Javier García Marín. Computational Insight into the Selective Allosteric Inhibition for PTP1B versus TCPTP. Journal of Biomolecular Structure and Dynamics. 39 - 15, pp. 5399 - 5410. Taylor and Francis, 08/07/2020. ISSN 1538-0254

**DOI:** 10.1080/07391102.2020.1790421

**Tipo de producción:** Artículo científico

**Posición de firma:** 1

**Nº total de autores:** 1

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)

**Índice de impacto:** 3.310

**Posición de publicación:** 23

**Tipo de soporte:** Revista

**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

**Autor de correspondencia:** Sí

**Categoría:** Biophysics

**Revista dentro del 25%:** Sí

**Num. revistas en cat.:** 73

## Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **Título del trabajo:** Modulating the pseudokinase Integrin-Linked Kinase through new small molecules  
**Nombre del congreso:** XX Simposio de Jóvenes Investigadores Químicos de la Real Sociedad Española de Química  
**Tipo evento:** Congreso  
**Autor de correspondencia:** Sí  
**Ciudad de celebración:** Ciudad Real, España  
**Fecha de celebración:** 18/11/2024  
**Fecha de finalización:** 21/11/2024  
**Entidad organizadora:** Real Sociedad Española de Química **Tipo de entidad:** Real Sociedad Química  
 Javier García Marín; Diego Rodríguez Puyol; Sergio de Frutos García; Jose Luis Aceña Bonilla; Laura Calleros Basilio; Ana María Carozo; Mercedes Griera Merino; Marta Durán.
- 2** **Título del trabajo:** Aproximación terapéutica contra la resistencia a la insulina mediante el uso de una nueva molécula activadora del andamiaje celular  
**Nombre del congreso:** 54 Congreso Nacional de la Sociedad Española de Nefrología



**Autor de correspondencia:** No

**Ciudad de celebración:** Valencia, España

**Fecha de celebración:** 08/11/2024

**Fecha de finalización:** 10/11/2024

**Entidad organizadora:** Sociedad Española de Nefrología

**Tipo de entidad:** Asociaciones y Agrupaciones

Mercedes Griera Merino; Javier García Marín; Alba Silvestre Vargas; Gema Olmos Centenera; Sara Ruiz Velázquez; Sergio García Villoria; Laura Calleros Basilio; Diego Rodríguez Puyol; Sergio de Frutos García.

**3 Título del trabajo:** Modulation of N-terminal oxidation by the thiol dioxygenase AtPCO4

**Nombre del congreso:** Protein Termini: From Insight to Impact

**Tipo evento:** Congreso

**Autor de correspondencia:** No

**Ciudad de celebración:** Oxford, Reino Unido

**Fecha de celebración:** 08/09/2024

**Fecha de finalización:** 11/09/2024

**Entidad organizadora:** Federation of European Biochemical Societies

1; Ana Dirr; Victor Mikhailova; Monica Perri; Javier Garcia Marin; Phil Holdshipd; Vinay Shukla; Carmen Domene; Francesco Licausi; Emily Flashman.

**4 Título del trabajo:** Targeting chronic kidney disease trough new small molecules modulating the pseudokinase Integrin-Linked Kinase

**Nombre del congreso:** X Simposio de Jóvenes Investigadores SEQT

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Ciudad de celebración:** Madrid, España

**Fecha de celebración:** 12/07/2024

**Fecha de finalización:** 12/07/2024

**Entidad organizadora:** SOCIEDAD ESPAÑOLA DE QUIMICA TERAPEUTICA

1; Marta Durán Martínez; Mercedes Griera Merino; Sergio de Frutos García; José Luis Aceña Bonilla; Laura Calleros Basilio; Diego Rodríguez Puyol; Javier García Marín.

**5 Título del trabajo:** Mixing potions and pixels: a road to the university in the field of Pharmaceutical Chemistry

**Nombre del congreso:** Escuela de Química 2024

**Tipo evento:** Jornada

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

**Autor de correspondencia:** Sí

**Ciudad de celebración:** Alcalá de Henares, España

**Fecha de celebración:** 10/07/2024

**Fecha de finalización:** 12/07/2024

**Entidad organizadora:** Escuela de Doctorado UAH

Javier García Marín.

**6 Título del trabajo:** Unveiling how point mutations affect NUDT15 dynamics with in silico approaches

**Nombre del congreso:** SECUAH 2023

**Tipo evento:** Congreso

**Ámbito geográfico:** Nacional

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Autor de correspondencia:** Sí

**Ciudad de celebración:** Alcalá de Henares, Comunidad de Madrid, España

**Fecha de celebración:** 21/03/2023

**Fecha de finalización:** 24/03/2023



**Entidad organizadora:** Universidad de Alcalá

**Tipo de entidad:** Universidad

**Con comité de admisión ext.:** Sí

García Mar-in 1; Gómez Rubio. "Unveiling how point mutations affect NUDT15 dynamics with in silico approaches". En: Dianas. 12 - 1, Disponible en Internet en: <<http://hdl.handle.net/10017/15181>>. ISSN 1886-8746

**7 Título del trabajo:** Atomic Insights into the TRPM8 Activation by Small Molecules Through Computational Approaches

**Nombre del congreso:** VI RSEQ Chemical Biology Group Meeting (ChemBioVI)

**Tipo evento:** Congreso

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Autor de correspondencia:** Sí

**Ciudad de celebración:** Valencia, España

**Fecha de celebración:** 06/03/2023

**Fecha de finalización:** 08/03/2023

**Entidad organizadora:** Real Sociedad Española de Química **Tipo de entidad:** GEQB

Javir García Marín; Carmen Domene.

**8 Título del trabajo:** Functional mapping of the protein-protein interaction between integrin-linked kinase and alpha-parvin and its biological response

**Nombre del congreso:** VI RSEQ Chemical Biology Group Meeting (ChemBioVI)

**Tipo evento:** Congreso

**Tipo de participación:** Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)

**Autor de correspondencia:** Sí

**Ciudad de celebración:** Valencia, España

**Fecha de celebración:** 06/03/2023

**Fecha de finalización:** 08/03/2023

**Entidad organizadora:** Real Sociedad Española de Química **Tipo de entidad:** GEQB

Javier García Marín; Sergio de Frutos; Mercedes Griera Merino; Manuel Rodríguez Puyol; Ramón Alajarín Ferrández; Diego Rodríguez Puyol; Juan José Vaquero López.

**9 Título del trabajo:** Computational Studies on SARS-CoV-2 Spike Protein Receptor Binding Domain: Drug Repurposing and Beyond (No Periódico)

**Nombre del congreso:** Molecular Simulation 2022 (MolSim 2022): Past, Present & Future

**Tipo evento:** Congreso

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Tipo de participación:** Participativo - Póster

**Intervención por:** Acceso por inscripción libre

**Autor de correspondencia:** Sí

**Ciudad de celebración:** Erice, Italia

**Fecha de celebración:** 25/06/2022

**Fecha de finalización:** 29/06/2022

**Entidad organizadora:** The Royal Society of Chemistry

**Ciudad entidad organizadora:** Londres, Reino Unido

**Con comité de admisión ext.:** Sí

Javier Garcia Marin; Anmol Adhav; Alberto Marina; Sonsoles Martin Santamaria.

**10 Título del trabajo:** Deciphering the role of O<sub>2</sub> molecule in oxygenases catalysis (No Periódico)

**Nombre del congreso:** Hybrid Quantum Mechanics / Molecular Mechanics (QM/MM) Approaches to Biochemistry and Beyond

**Tipo evento:** Congreso

**Ámbito geográfico:** Unión Europea

**Intervención por:** Acceso por inscripción libre



**Ciudad de celebración:** Lausanne, Suiza

**Fecha de celebración:** 16/05/2022

**Fecha de finalización:** 20/05/2022

**Entidad organizadora:** Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire  
Garcia Marin Javier; Carmen Domene.

## Actividades de divulgación

- 1 Título del trabajo:** La perspectiva en 3D de las moléculas de la vida: salud y enfermedad  
**Nombre del evento:** Semana de la Ciencia  
**Tipo de evento:** Conferencias impartidas  
**Ciudad de celebración:** Madrid, España  
**Fecha de celebración:** 02/11/2021  
**Entidad organizadora:** Centro de Investigaciones Biológicas      **Tipo de entidad:** Agencia Estatal
- 2 Título del trabajo:** Bioquímica Computacional: Cómo ayudan los ordenadores en la investigación del SARS-CoV-2  
**Nombre del evento:** Ponencias Divulgativas AEBE  
**Tipo de evento:** Conferencias impartidas  
**Ciudad de celebración:** Madrid, España  
**Fecha de celebración:** 11/11/2020  
**Entidad organizadora:** AEBE
- 3 Título del trabajo:** El apasionante viaje del descubrimiento de fármacos  
**Nombre del evento:** Semana de la Ciencia  
**Tipo de evento:** Conferencias impartidas  
**Ciudad de celebración:** Madrid, España  
**Fecha de celebración:** 12/10/2020  
**Entidad organizadora:** Centro de Investigaciones Biológicas      **Tipo de entidad:** Agencia Estatal  
**Ciudad entidad organizadora:** Madrid, España
- 4 Título del trabajo:** La perspectiva en 3D de la infección bacteriana y vírica  
**Nombre del evento:** Semana de la Ciencia  
**Tipo de evento:** Conferencias impartidas  
**Ciudad de celebración:** Madrid, España  
**Fecha de celebración:** 12/10/2020  
**Entidad organizadora:** Centro de Investigaciones Biológicas      **Tipo de entidad:** Agencia Estatal



## Gestión de I+D+i y participación en comités científicos

### Comités científicos, técnicos y/o asesores

- Título del comité:** Miembro del tribunal de Tesis Doctoras de Álvaro Gonzalez Molina  
**Entidad de afiliación:** Universidad de Alcalá      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de inicio-fin:** 12/04/2024 - 12/04/2024
- Título del comité:** Miembro del tribunal de tesis de Elena Gómez Rubio  
**Entidad de afiliación:** Universidad de Alcalá (Estancia en Universidad de Bath)  
**Fecha de inicio:** 03/10/2022

## Otros méritos

### Ayudas y becas obtenidas

- Nombre de la ayuda:** Ayudas Margarita Salas para la formación de jóvenes doctores  
**Finalidad:** Posdoctoral  
**Entidad concesionaria:** Universidad de Alcalá      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de concesión:** 29/11/2021      **Duración:** 2 años  
**Fecha de finalización:** 28/02/2024  
**Entidad de realización:** University of Bath
- Nombre de la ayuda:** Beca de Investigación en el Extranjero  
**Finalidad:** Posdoctoral  
**Entidad concesionaria:** Fundación Alfonso Martín Escudero      **Tipo de entidad:** Fundación  
**Fecha de concesión:** 15/11/2021      **Duración:** 2 años  
**Fecha de finalización:** 25/02/2024  
**Entidad de realización:** University of Bath
- Nombre de la ayuda:** Ayuda para la Formación del Profesorado Universitario (FPU)  
**Finalidad:** Predoctoral  
**Entidad concesionaria:** MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA  
**Fecha de concesión:** 25/09/2017      **Duración:** 32 meses  
**Fecha de finalización:** 30/04/2020  
**Entidad de realización:** Universidad de Alcalá  
**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Farmacia
- Nombre de la ayuda:** Ayudas de Movilidad del Personal Docente y Personal Investigador  
**Finalidad:** Predoctoral  
**Entidad concesionaria:** Universidad de Alcalá      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Importe de la ayuda:** 3 €  
**Fecha de concesión:** 02/02/2018      **Duración:** 3 meses  
**Fecha de finalización:** 30/09/2018  
**Entidad de realización:** University of Bristol  
**Facultad, instituto, centro:** School of Chemistry, Centre for Computational Chemistry



- 5** **Nombre de la ayuda:** Contrato Predoctoral Para Formación del Personal Investigador UAH  
**Finalidad:** Predoctoral  
**Entidad concesionaria:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de concesión:** 01/05/2016 **Duración:** 3 años  
**Fecha de finalización:** 30/09/2017  
**Entidad de realización:** FUNDACION GENERAL DE LA UNIVERSIDAD DE ALCALA DE HENARES  
**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Farmacia
- 6** **Nombre de la ayuda:** Beca de Colaboración en Departamentos  
**Finalidad:** Iniciación a la Investigación  
**Entidad concesionaria:** MINISTERIO DE EDUCACION Y CIENCIA  
**Fecha de concesión:** 14/11/2013  
**Fecha de finalización:** 05/07/2014  
**Entidad de realización:** Universidad Complutense de Madrid  
**Facultad, instituto, centro:** Facultad de Farmacia
- 7** **Nombre de la ayuda:** International Summer Training Programm  
**Ciudad entidad concesionaria:** Madrid, Comunidad de Madrid, España  
**Finalidad:** Predoctoral  
**Entidad concesionaria:** Centro Nacional de Investigaciones Oncológicas **Tipo de entidad:** Instituciones Sanitarias  
**Fecha de concesión:** 15/05/2013 **Duración:** 3 meses  
**Fecha de finalización:** 16/08/2013  
**Entidad de realización:** Centro Nacional de Investigaciones Oncológicas  
**Facultad, instituto, centro:** Sección de Terapias Experimentales

## Sociedades científicas y asociaciones profesionales

- 1** **Nombre de la sociedad:** American Chemical Society  
**Ciudad entidad afiliación:** Estados Unidos de América  
**Fecha de inicio-fin:** 11/05/2019 - 11/04/2020
- 2** **Nombre de la sociedad:** Sociedad Española de Farmacología  
**Entidad de afiliación:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Ciudad entidad afiliación:** Alcalá de Henares, España  
**Fecha de inicio:** 19/01/2024
- 3** **Nombre de la sociedad:** Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular  
**Entidad de afiliación:** Universidad de Alcalá **Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de inicio:** 03/01/2022
- 4** **Nombre de la sociedad:** Real Sociedad Española de Química  
**Ciudad entidad afiliación:** Madrid, Comunidad de Madrid, España  
**Fecha de inicio:** 23/07/2015
- 5** **Nombre de la sociedad:** Sociedad Española de Química Teraéutica  
**Ciudad entidad afiliación:** Madrid, Comunidad de Madrid, España  
**Fecha de inicio:** 05/03/2015



C  
V  
n

## Premios, menciones y distinciones

- 1 Descripción:** Premio Extraordinario de Doctorado  
**Entidad concesionaria:** Universidad de Alcalá      **Tipo de entidad:** Universidad  
**Fecha de concesión:** 14/07/2022
- 2 Descripción:** Chemistry Europe Flash Communication Award  
**Entidad concesionaria:** European Chemical Society Publishing  
**Fecha de concesión:** 22/06/2022
- 3 Descripción:** Premio ASISA  
**Entidad concesionaria:** Real Academia Nacional de Farmacia      **Tipo de entidad:** Real Academia Nacional  
**Fecha de concesión:** 14/12/2021
- 4 Descripción:** Premio Janssen-Cilag de la Sociedad Española de Química Terapéutica para jóvenes investigadores  
**Entidad concesionaria:** Sociedad Española de Química Terapéutica  
**Fecha de concesión:** 15/09/2021
- 5 Descripción:** BioSolveIT Scientific Challenge: Summer 2020  
**Entidad concesionaria:** BioSolveIT  
**Fecha de concesión:** 15/06/2021
- 6 Descripción:** Premio OTIMES FARMAPRAXIS  
**Entidad concesionaria:** Real Academia Nacional de Farmacia      **Tipo de entidad:** Academia  
**Ciudad entidad concesionaria:** Madrid, Comunidad de Madrid, España  
**Fecha de concesión:** 12/12/2019