



JOAQUÍN ORTEGA CASTRO

Generado desde: Universitat de les Illes Balears

Fecha del documento: 25/09/2023

v 1.4.0

b8c7b87316c4c288b02c59b4c5be9b95

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/>

**JOAQUÍN ORTEGA CASTRO**

Apellidos: ORTEGA CASTRO
Nombre: JOAQUÍN
DNI: 44292759A
ORCID: 0000-0001-8131-0315
ResearcherID: L-4956-2014
ScopusID: 25121999400
Fecha de nacimiento: 07/02/1976
Sexo: Hombre
Nacionalidad: España
País de nacimiento: España
Ciudad de nacimiento: Granada (GRANADA)
Dirección de contacto: Edifici Mateu Orfila i Rotger, Campus universitari. Cra. de Valldemossa, km 7.5, Palma, (Illes Balears).
Código postal: 07122
País de contacto: España
Ciudad de contacto: Palma
Teléfono fijo: 971259833 - 9833
Fax: 971173426
Correo electrónico: joaquin.castro@uib.es

Situación profesional actual

Entidad empleadora: Universidad de las Islas Baleares

Departamento: Facultad de Ciencias, Departamento de Química

Categoría profesional: Profesor titular de universidad

Ciudad entidad empleadora: Palma, España

Teléfono: 971259833 - 9833

Fax: 971173426

Correo electrónico: joaquin.castro@uib.es

Fecha de inicio: 24/10/2017

Modalidad de contrato: Funcionario/a

Régimen de dedicación: Tiempo completo

Primaria (Cód. Unesco): 221000 - Química física

Secundaria (Cód. Unesco): 230000 - Química

Terciaria (Cód. Unesco): 221028 - Química del estado sólido

Funciones desempeñadas: CUMPLIMENTE LA DEDICACIÓN PROFESIONAL EN EL APARTADO DE TEXTOS DEL CURRÍCULUM

Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
1	Universidad de las Islas Baleares	Profesor Contratado Doctor	01/10/2011
2	Universidad de las Islas Baleares	Profesor Ayudante Doctor	01/10/2009
3	Universidad de las Islas Baleares	Profesor Ayudante	01/10/2006
4	Estación Experimental del Zaidin/CSIC		01/06/2006

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
		Titulado Superior de Investigación y Laboratorio	
5	Estación Experimental del Zaidín. (CSIC).	Becario de Investigación	01/05/2003
6	Universidad de Friedrich-Alexander Erlangen-Nürnberg	Profesor de Química	01/02/2002
7	Universidad de las Islas Baleares	Profesor Titular de Universidad	24/10/2017

- 1 **Entidad empleadora:** Universidad de las Islas Baleares
Categoría profesional: Profesor Contratado Doctor
Fecha de inicio-fin: 01/10/2011 - 23/10/2017 **Duración:** 6 años - 23 días
- 2 **Entidad empleadora:** Universidad de las Islas Baleares
Categoría profesional: Profesor Ayudante Doctor
Fecha de inicio-fin: 01/10/2009 - 30/09/2011 **Duración:** 2 años
- 3 **Entidad empleadora:** Universidad de las Islas Baleares
Categoría profesional: Profesor Ayudante
Fecha de inicio-fin: 01/10/2006 - 30/09/2009 **Duración:** 3 años
- 4 **Entidad empleadora:** Estación Experimental del Zaidín/CSIC
Categoría profesional: Titulado Superior de Investigación y Laboratorio
Fecha de inicio-fin: 01/06/2006 - 09/2006 **Duración:** 3 meses - 1 día
- 5 **Entidad empleadora:** Estación Experimental del Zaidín. (CSIC).
Categoría profesional: Becario de Investigación
Fecha de inicio-fin: 01/05/2003 - 31/05/2006 **Duración:** 3 años - 1 mes
- 6 **Entidad empleadora:** Universidad de Friedrich-Alexander Erlangen-Nürnberg
Categoría profesional: Profesor de Química
Fecha de inicio-fin: 01/02/2002 - 17/01/2003 **Duración:** 11 meses - 17 días
- 7 **Entidad empleadora:** Universidad de las Islas Baleares
Categoría profesional: Profesor Titular de Universidad
Fecha de inicio: 24/10/2017



Formación académica recibida

Titulación universitaria

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

Titulación universitaria: Diplomatura / Licenciatura / Grado

Nombre del título: Licenciatura de Ciencias Químicas

Entidad de titulación: Universidad de Granada

Fecha de titulación: 08/07/2002

Doctorados

Programa de doctorado: Doctor en Ciencias Químicas

Entidad de titulación: Universidad de Granada

Tipo de entidad: Universidad

Fecha de titulación: 30/07/2007

Título de la tesis: Investigación mecano-cuántica del orden/desorden catónico y propiedades elásticas de filosilicatos 2:1 dioctaédricos.

Director/a de tesis: Alfonso Hernández Laguna, Claro Ignacio Sainz Díaz

Calificación obtenida: Sobresaliente cum laude

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

Tipo de la formación: Curso

Título de la formación: La acción tutorial on-line en la universidad

Entidad de titulación: Universidad de las islas baleares **Tipo de entidad:** Universidad

Fecha de finalización: 27/10/2009

Actividad docente

Formación académica impartida

- Tipo de docencia:** Docencia no oficial
Nombre de la asignatura/curso: SEMINARIO IMPARTIDO: NUEVOS INHIBIDORES DE PRODUCTOS FINALES DE LA GLICACION AVANZADA
Tipo de programa: Cursos y Seminarios Impartidos
Fecha de inicio: 22/08/2008
Fecha de finalización: 22/08/2008
Entidad de realización: Estación Experimental del Zaidin (CSIC)



- 2** **Tipo de docencia:** Docencia no oficial
Nombre de la asignatura/curso: SEMINARIO IMPARTIDO: PROPIEDADES ELASTICAS EN FILOSILICATOS 2:1 DIOCTAEDRICOS. EFECTO DE LA SUBSTITUCION ISOMORFICA.
Tipo de programa: Cursos y Seminarios Impartidos
Fecha de inicio: 19/08/2008
Fecha de finalización: 19/08/2008
Entidad de realización: Estación Experimental del Zaidin (CSIC)
- 3** **Tipo de docencia:** Docencia no oficial
Nombre de la asignatura/curso: SEMINARIO IMPARTIDO: CORRELACION ELECTRONICA MEDIANTE EL HUECO DE COULOMB BLANDO. HARTREE-FOCK Y B3LYP VERSUS EL METODO DEL HUECO DE COULOMB.
Tipo de programa: Cursos y Seminarios Impartidos
Fecha de inicio: 12/08/2008
Fecha de finalización: 12/08/2008
Entidad de realización: Estación Experimental del Zaidin (CSIC)
- 4** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: 4815 - Introducció a l'Experimentació en Química Física; Ct= 9, Cim= 1; profesor; Universidad de las Islas Baleares
Tipo de programa: Docencia en primer ciclo
Fecha de inicio: 2008
Fecha de finalización: 2009
- 5** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: 2565 - Perspectives de la Química; C= 6; C.im= 1; profesor; Universidad de las Islas Baleares.
Tipo de programa: Docencia en primer ciclo
Fecha de inicio: 2008
Fecha de finalización: 2009
- 6** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: 4802 - Enllaç Químic i Estructura de la Matèria; C= 6; C.im= 3; profesor; Universidad de las Islas Baleares.
Tipo de programa: Docencia en primer ciclo
Fecha de inicio: 2008
Fecha de finalización: 2009
- 7** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: 2862 - Iniciació a la Química; C= 2,5; C. im= 2,5; responsable asignatura; Universidad de las Islas Baleares.
Tipo de programa: Docencia en primer ciclo
Fecha de inicio: 2007
Fecha de finalización: 2008
- 8** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: 4815 - Introducció a l'Experimentació en Química Física; Ct= 9, Cim= 2; profesor; Universidad de las Islas Baleares
Tipo de programa: Docencia en primer ciclo
Fecha de inicio: 2007
Fecha de finalización: 2008



- 9** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: 2565 - Perspectives de la Química; Ct= 6; Ci= 1; profesor; Universidad de las Islas Baleares.
Tipo de programa: Docencia en primer ciclo
Fecha de inicio: 2007
Fecha de finalización: 2008
- 10** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: 4823 - Experimentació en Química Física; C= 5; C. im= 1 ; profesor; Universidad de las Islas Baleares.
Tipo de programa: Docencia en segundo ciclo
Fecha de inicio: 2007
Fecha de finalización: 2008
- 11** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: 2565 - Perspectives de la Química; C= 6; C.im= 1; profesor; Universidad de las Islas Baleares.
Tipo de programa: Docencia en primer ciclo
Fecha de inicio: 2006
Fecha de finalización: 2007
- 12** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: 4815 - Introducció a l'Experimentació en Química Física;C= 9; C. im= 2; profesor; Universidad de las Islas Baleares
Tipo de programa: Docencia en primer ciclo
Fecha de inicio: 2006
Fecha de finalización: 2007
- 13** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: 4832-Fonaments de Química Ambiental; Ct= 6; Cim= 3; responsable asignatura; Universidad de las Islas Baleares.
Tipo de programa: Docencia en primer ciclo
Fecha de inicio: 2006
Fecha de finalización: 2007
- 14** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: 4823 - Experimentació en Química Física; C= 5; C.im= 1; profesor; Universidad de las Islas Baleares.
Tipo de programa: Docencia en segundo ciclo
Fecha de inicio: 2006
Fecha de finalización: 2007

Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera

- 1** **Título del trabajo:** EXPLORANDO LA DEPOSICIÓN Y ADSORCIÓN DE INHIBIDORES DE LA CRISTALIZACIÓN SOBRE LA SUPERFICIE 101 DE LA HIDROXIAPATITA CON SIMULACIONES POR ORDENADOR
Tipo de proyecto: Trabajo de Fin de Grado
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Arnau Puig Colom



Fecha de defensa: 2021

- 2 Título del trabajo:** Explorando perovskitas sin plomo como materiales eficientes en la absorción de energía solar mediante simulaciones por ordenador.
Tipo de proyecto: Trabajo de Fin de Grado
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Bernat Amengual Riera
Fecha de defensa: 2021
- 3 Título del trabajo:** On the structural and conformational effects of glycation and metal binding on the intrinsically disordered protein alpha-synuclein
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Rafael Ramis Cortés
Calificación obtenida: Sobresaliente cum laude
Fecha de defensa: 2020
- 4 Título del trabajo:** DECIPHERING THE MOLECULAR DESCRIPTORS THAT MODULATE THE THERAPEUTIC APPLICATIONS OF BISPHOSPHONATES AS PATHOLOGICAL DEPOSITION INHIBITORS AND ANTIRESORPTIVE BONE DRUGS FOR FURTHER RATIONAL DESIGN OF NEW DRUGS BASED ON CRYSTAL GROWTH INHIBITORS
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: David Fernández Payeras
Calificación obtenida: Sobresaliente cum laude
Fecha de defensa: 2017
- 5 Título del trabajo:** Estudio de los mecanismos de formación del 8-oxo-G
Tipo de proyecto: Trabajo de Fin de Grado
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Jaume Servera Castell
Fecha de defensa: 2017
- 6 Título del trabajo:** A DFT study on the complexation of metal cations by the protein alpha-synuclein
Tipo de proyecto: Tesis de Máster
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Ramis Cortés, Rafael
Calificación obtenida: Sobresaliente
Fecha de defensa: 2016
- 7 Título del trabajo:** Degradació atmosfèrica del isoprè pels radicals hidroxil i nitrat.
Tipo de proyecto: Trabajo de Fin de Grado
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Antoni Salom Català
Fecha de defensa: 2016



- 8 Título del trabajo:** DFT study of the free radical scavenging activity of Pyridoxine for the AGEs inhibition
Tipo de proyecto: Tesis de Máster
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Pascual Estarellas, Marta
Calificación obtenida: Matrícula de Honor
Fecha de defensa: 2014
- 9 Título del trabajo:** Estudio DFT de la reactividad sobre superficies aminofosfolípicas. Mecanismos de Reacciones relacionadas con la generación de productos de glicación avanzada (AGEs).
Tipo de proyecto: Tesis Doctoral
Entidad de realización: Universitat de les Illes Balears.
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Christian Solis Calero
Calificación obtenida: Apto cum laude
Fecha de defensa: 2014
- 10 Título del trabajo:** Estudio Teórico de las Propiedades de la Piridoxamina (Vitamina B6) en la Inhibición de AGEs pro Eliminación de Radicales Libres
Tipo de proyecto: Tesis de Máster
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Caballero López, Carmen
Calificación obtenida: Matrícula de Honor
Fecha de defensa: 2013
- 11 Título del trabajo:** Estudio 3D-QSAR de la Inhibición de la Farnesil Pirofosfato Sintasa Humana por acción de los nitrógeno bifosfonatos
Tipo de proyecto: Tesis de Máster
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares
Ciudad entidad realización: España
Alumno/a: Fernández Payeras, David
Calificación obtenida: Matrícula de Honor
Fecha de defensa: 2012

Publicaciones docentes o de carácter pedagógico, libros, artículos, etc.

- 1** Donoso J.; Ortega-Castro J.; Vilanova B.; Frau J.; Muñoz F.. Proceedings of EDULEARN2010 Conference. pp. 761 - 769. (España): 2010. Disponible en Internet en: <>>. ISBN 978-84-613-9386-2
Nombre del material: A blended learning project in general chemistry for undergraduated levels in chemistry and biochemistry degrees.
Fecha de elaboración: 2010
- 2** Donoso, J.; Ortega-Castro J.; Vilanova B.; Frau J.; Muñoz F.. A blended learning project in general chemistry for undergraduate levels in chemistry and biochemistry degrees. EDULEARN10- Proceedings. pp. 761 - 769. (España): 2010.
Nombre del material: Artículo
Tipo de soporte: Artículo/s
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de publicación de carácter divulgativo



Otras actividades/méritos no incluidos en la relación anterior

- Descripción de la actividad:** Otros méritos docentes: Participación activa en el programa DemoLab de la Facultad de Ciencias de la Universidad de las Islas Baleares.
Fecha de finalización: 2009
- Descripción de la actividad:** Otros méritos docentes: Certificado en la Experiencia de implantación de los créditos ECTS en el primer curso de la titulación de Química.
Entidad organizadora: Universidad de las islas baleares
Fecha de finalización: 2009
- Descripción de la actividad:** Otros méritos docentes: 6º Fira de la Ciència de les Illes Balears de Mallorca; Colaborador; 15 horas; Universidad de las Islas Baleares.
Fecha de finalización: 31/05/2007
- Descripción de la actividad:** Otros méritos docentes: 6º Fira de la Ciència de les Illes Balears de Menorca; Colaborador; 25 horas; Universidad de las Islas Baleares.
Fecha de finalización: 10/05/2007

Experiencia científica y tecnológica

Actividad científica o tecnológica

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

- Nombre del proyecto:** Tecnologías de Cristales Líquidos para Aplicaciones Fotovoltaicas (MESOSUN)
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Bartolomé Soberats Reus; Antonio Frontera Beccaria
Nº de investigadores/as: 7
Entidad/es financiadora/s:
Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN) **Tipo de entidad:** Ministerios
Ciudad entidad financiadora: 28027-Madrid, España
Cód. según financiadora: TED2021-130946B-I00
Fecha de inicio-fin: 01/12/2022 - 30/11/2024 **Duración:** 2 años
Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears
Cuantía total: 175.030 €
- Nombre del proyecto:** Relación entre la diabetes mellitus y la enfermedad del Parkinson: estudio de los mecanismos moleculares que inducen la glicación y agregación de la alfa-sinucleína. Acrónimo: DIMEPARK
Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad realización: España
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Frau Munar; Bartolomé Vilanova Canet



Nº de investigadores/as: 12

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO) **Tipo de entidad:** Ministerios

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: CTQ2014-55835-R

Fecha de inicio-fin: 01/01/2015 - 31/12/2018

Duración: 4 años

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuántía total: 76.230 €

- 3 Nombre del proyecto:** Formación de productos avanzados de glicación de la α -sinucleína, proteína asociada a la enfermedad del Parkinson: efecto de los cationes metálicos en la agregación

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Frau Munar

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

Conselleria d'Innovació, Recerca i Turisme

Tipo de entidad: Comunidades Autónomas

Ciudad entidad financiadora: Palma, España

Cód. según financiadora: AAEE49/2015

Fecha de inicio-fin: 01/01/2016 - 15/09/2016

Duración: 8 meses - 15 días

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuántía total: 10.024 €

- 4 Nombre del proyecto:** Relación entre la diabetes y las complicaciones cardiovasculares. Mecanismo de inhibición de los AGEs entrecruzados

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Frau Munar

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

Conselleria d'Educació, Cultura i Universitats

Tipo de entidad: Comunidades Autónomas

Ciudad entidad financiadora: Palma de Mallorca, España

Cód. según financiadora: AAEE 27/2014

Fecha de inicio-fin: 01/01/2015 - 30/09/2015

Duración: 9 meses

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuántía total: 17.515 €

- 5 Nombre del proyecto:** Reactivitat química i disseny de fàrmacs

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Francisco Muñoz Izquierdo

Nº de investigadores/as: 10

Entidad/es financiadora/s:

Conselleria d'Innovació, Interior i Justícia

Tipo de entidad: Administraciones Públicas

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: 21/2011

Fecha de inicio-fin: 01/12/2011 - 30/11/2014

Duración: 3 años



Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 12.000 €

6 Nombre del proyecto: Eliminación de radicales libres asociado al mecanismo de inhibición de AGEs

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Frau Munar

Nº de investigadores/as: 10

Entidad/es financiadora/s:

Conselleria d'Educació, Cultura i Universitats

Tipo de entidad: Comunidades Autónomas

Ciudad entidad financiadora: Palma de Mallorca, España

Cód. según financiadora: AAEE044/2012

Fecha de inicio-fin: 01/02/2013 - 15/10/2013

Duración: 8 meses - 15 días

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 16.478,7 €

7 Nombre del proyecto: Estudio de la inhibición de la Formación de ALE

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Francisco Muñoz Izquierdo

Nº de investigadores/as: 7

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Educación y Ciencia

Tipo de entidad: Ministerios

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: CTQ2008 02207

Fecha de inicio-fin: 01/01/2009 - 31/12/2011

Duración: 3 años

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 114.950 €

8 Nombre del proyecto: Tècniques per a l'estudi de les molècules: fonaments senzills de tècniques complexes

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Josefa Laurentina Donoso Pardo

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

Conselleria d'Innovació, Interior i Justícia

Tipo de entidad: Administraciones Públicas

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: 023FC2011

Fecha de inicio-fin: 17/01/2011 - 15/06/2011

Duración: 5 meses

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 8.000 €

9 Nombre del proyecto: Les eines dels investigadors per identificar i caracteritzar substàncies: Cromatografia en columna i colorimetria, dues tècniques per separar i quantificar substàncies

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad



Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Josefa Laurentina Donoso Pardo

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

Conselleria d'Innovació, Interior i Justícia

Tipo de entidad: Administraciones Públicas

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: 025FC2010

Fecha de inicio-fin: 01/01/2010 - 31/08/2010

Duración: 8 meses

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 6.800 €

- 10 Nombre del proyecto:** Aplicació de la ressonància magnètica nuclear (RMN) a l'estudi de les proteïnes implicades a l'ataxia. El cas de la frataxina

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Josefa Laurentina Donoso Pardo

Nº de investigadores/as: 9

Entidad/es financiadora/s:

Conselleria d'Economia, Hisenda i Innovació. Govern de les Illes Balears

Tipo de entidad: Administraciones Públicas

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: AAEE 0043 08

Fecha de inicio-fin: 19/01/2009 - 15/10/2009

Duración: 8 meses - 27 días

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 7.000 €

- 11 Nombre del proyecto:** Estudio de los mecanismo de inhibición de la formación de los AGEs asociados a los estados de hiperglucemia

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Frau Munar

Nº de investigadores/as: 8

Entidad/es financiadora/s:

Conselleria d'Economia, Hisenda i Innovació. Govern de les Illes Balears

Tipo de entidad: Administraciones Públicas

Ciudad entidad financiadora: España

Cód. según financiadora: PROGECIB 28 A

Fecha de inicio-fin: 01/01/2007 - 31/12/2008

Duración: 2 años

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 32.500 €

- 12 Nombre del proyecto:** "Investigación teórica de la influencia de la substitución isomórfica de cationes sobre los mecanismos de las reacciones de deshidroxilación de silicatos laminares"

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Alfonso Hernández Laguna

Entidad/es financiadora/s:

Plan Nacional de Investigación y Desarrollo
Ciudad entidad financiadora: Desconocido

Tipo de entidad: Otros organismos

Cód. según financiadora: CGL2005-02681/BTE

Fecha de inicio-fin: 2005 - 2008

Duración: 3 años - 1 día

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 65.000 €

13 Nombre del proyecto: Efecto de la sustitución isomórfica de cationes y su distribución sobre las propiedades cristalográficas y las reacciones de deshidroxilación en silicatos laminares

Entidad de realización: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad realización: España

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Alfonso Hernández Laguna

Entidad/es financiadora/s:

DGI

Tipo de entidad: Otros organismos

Ciudad entidad financiadora: Desconocido

Cód. según financiadora: BTE2002-03838

Fecha de inicio-fin: 2002 - 2006

Duración: 4 años - 1 día

Entidad/es participante/s: Universitat de les Illes Balears

Cuantía total: 103.155 €

Resultados

Propiedad industrial e intelectual

Título propiedad industrial registrada: IP4-4,6 SUBSTITUTED DERIVATIVE COMPOUNDS

Descripción de cualidades: The present invention provides IP4-4,6 substituted derivatives, their methods of synthesis and their uses. In some aspects, the IP4-4,6 derivative is a compound of formula I wherein R1, R3, R7, and R11 are OPO32-, and R5 and R9 are selected from the group consisting of -O(Alkyl)nX, -O(Alkyl)yCy(Alkyl2)y-Z, -O(Alkyl)yA(Alkyl)y-Z', and their thiophosphate analogs. Also provided are methods, pharmaceutical compositions and formulations, methods of use, articles of manufacture, and kits for the treatment of diseases and conditions such as pathological crystallization-related diseases and conditions.

Tipo de propiedad industrial: Diseños industriales

Secreto empresarial: Si

Inventores/autores/obtentores: PÉREZ FERRER MARÍA DEL MAR [ES]; FERRER REYNÉS MIQUEL DAVID [ES]; BASSISSI MOHAMAD FIRAS [ES]; SALCEDO ROCA CAROLINA [ES]; SERRA COMAS CARMEN [ES]; CATENA RUIZ JUAN LORENZO [ES]; LLEBARIA SOLDEVILA AMADEU [ES]; ORTEGA CASTRO JOAQUÍN [ES]; PERELLÓ BESTARD JOAN [ES]

Fecha de registro: 29/01/2021

Patente internacional no UE: Si



Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1** Casasnovas, R.; Frau, J.; Ortega-Castro, J.; Salvà, A.; Donoso, J.; Muñoz, F. Absolute and relative pKa calculations of mono and diprotic pyridines by quantum methods. *Journal of Molecular Structure-Theochem.* 912, pp. 5 - 12. (Holanda): 2009. ISSN 0166-1280
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.theochem.2008.11.020>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148293>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 3
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL
Índice de impacto: 1.167 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 85 **Num. revistas en cat.:** 121
Fuente de citas: WOS **Citas:** 74
Publicación relevante: Si
- 2** Muñoz-Santiburcio, D.; Ortega-Castro, J.; Sainz-Díaz, I.; Huertas, J.; Hernández-Laguna, A. Theoretical study of the adsorption of 2-nitro-1-propanol on smectite surface models. *Journal of Molecular Structure-Theochem.* 912, pp. 95 - 104. (Holanda): 2009. Disponible en Internet en: http://ac.els-cdn.com/S0166128009000104/1-s2.0-S0166128009000104-main.pdf?_tid=c6faa44c-4861-11e3-80df-00000aabb0f27&acdnat=1383907233_f7601d3c54811cb0. ISSN 0166-1280
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.theochem.2009.01.001>
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 2
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR) **Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL
Índice de impacto: 1.167 **Revista dentro del 25%:** No
Posición de publicación: 85 **Num. revistas en cat.:** 121
Fuente de citas: WOS **Citas:** 9
Publicación relevante: Si
- 3** J. Ortega-Castro; M.T. Dove; A. Hernández-Laguna; C.I Sainz-Díaz. Distribuciones catiónicas binarias en la capa octaédrica de filosilicatos 2:1 dioctaédricos por métodos mecano-cuánticos. *Revista de la Sociedad Española de Mineralogía.* 6, pp. 337 - 339. (España): 2006.
Tipo de producción: Artículo científico **Tipo de soporte:** Revista
Posición de firma: 0
Publicación relevante: Si
- 4** Roy, S.; Dey, A.; Gomila, R.M.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Ray, P.P.; Chattopadhyay, S. Insight into charge transportation in cadmium based semiconducting organic-inorganic hybrid materials and their application in the fabrication of photosensitive Schottky devices. *Dalton Transactions.* 51 - 14, pp. 5721 - 5734. (Reino Unido): 2022. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/d2dt00197g>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 4

Nº total de autores: 7

Tipo de soporte: Revista

Citas: 1

- 5** Debsharma, K.; Dey, S.; Das, D.; Halder, S.; Ortega-Castro, J.; Sarkar, S.; Dutta, B.; Maity, S.; Jana, K.; Frontera, A.; Ray, P.P.; Sinha, C. Designing of a Zn(II)-isonicotinohydrazido thiophenyl based 2D coordination polymer: structure, augmented photoconductivity and superior biological activity. Crystengcomm. 25 - 1, pp. 162 - 172. (Reino Unido): 2022. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/d2ce01128j>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 5

Nº total de autores: 12

Tipo de soporte: Revista

- 6** Noemi, Hernández-Haro; Christian, Solis-Calero; Rodrigo, Casasnovas; Christophe, Morell; Andre, Grand; Juan, Frau; Joaquin Ortega-Castro. Formation Mechanism of Inter-Crosslink in DNA by Nitrogen Oxides Pollutants through A Diazonium Intermediate. International Journal Of Molecular Sciences. 23 - 18, pp. 10621. (Estados Unidos de América): 2022. ISSN 1422-0067

DOI: <https://doi.org/10.3390/ijms231810621>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 7

Nº total de autores: 7

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si

- 7** Rafael Ramis; Joaquín Ortega-Castro; Bartolomé Vilanova; Miquel Adrover; Juan Frau. Cu²⁺, Ca²⁺, and methionine oxidation expose the hydrophobic alpha-synuclein NAC domain. International Journal of Biological Macromolecules. 169, pp. 251 - 263. (Reino Unido): 2021. Disponible en Internet en: <<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S014181302035176X?via%3Dihub>>. ISSN 0141-8130

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2020.12.018>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 8.025

Posición de publicación: 46

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 8.025

Posición de publicación: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 8.025

Posición de publicación: 6

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si

Categoría: BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 297

Categoría: CHEMISTRY, APPLIED

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 73

Categoría: POLYMER SCIENCE

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 90

Citas: 5

- 8** Ahmed, F.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Mir, M.H. Semiconducting properties of pyridyl appended linear dicarboxylate based coordination polymers: Theoretical prediction: Via DFT study. Dalton Transactions. 50 - 1, pp. 270 - 278. (Reino Unido): 2021. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0dt03868g>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Tipo de soporte: Revista

**Nº total de autores:** 4**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.569**Posición de publicación:** 7**Fuente de citas:** WOS**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 46**Citas:** 6

- 9** Hossain, A.; Dey, A.; Seth, S.K.; Ray, P.P.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Anion-dependent structural variations and charge transport property analysis of 4-(3-pyridyl)-4,2:6,4-terpyridinium salts. Crystengcomm. 23 - 19, pp. 3569 - 3581. (Reino Unido): 2021. ISSN 1466-8033

DOI: <https://doi.org/10.1039/d1ce00248a>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 5**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 3.756**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 84**Num. revistas en cat.:** 179**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CRYSTALLOGRAPHY**Índice de impacto:** 3.756**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 6**Num. revistas en cat.:** 26**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 2**10**

Angeera Chandra; Dhananjay Das; Joaquín Ortega-Castro; Kaushik Naskar; Srikanta Jana; Antonio Frontera; Partha Pratim Ray; Chittaranjan Sinha. Cd(II) coordination polymer of fumaric acid and pyridyl-hydrazide Schiff base: Structure, photoconductivity and theoretical interpretation. Inorganica Chimica Acta. 518 - 120253, (Suiza): 2021. Disponible en Internet en: <<https://reader.elsevier.com/reader/sd/pii/S0020169321000098?token=2A208981764BC8CE527D5A4962D49616DFCDC4A1DCF4992EE9827B3E2CD24596DDA586B1B3AB3ED0E>> ISSN 0020-1693

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 3**Nº total de autores:** 8**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Índice de impacto:** 3.118**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 19**Num. revistas en cat.:** 46**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 11**11**

Dbuleanu, D.; Bauzá, A.; Ortega-Castro, J.; Escudero-Adán, E.C.; Ballester, P.; Frontera, A. Synthesis, X-ray Characterization and Density Functional Theory (DFT) Studies of Two Polymorphs of the ,,, Isomer of Tetra-p-Iodophenyl Tetramethyl Calix[4]pyrrole: On the Importance of Halogen Bonds. Molecules. 25 - 2, (Suiza): MDPI, 2020. ISSN 1420-3049

DOI: <https://doi.org/10.3390/molecules25020285>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 3**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY**Índice de impacto:** 4.411**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 116**Num. revistas en cat.:** 298**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY



Índice de impacto: 4.411
Posición de publicación: 63

Fuente de citas: WOS

Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 179

Citas: 2

- 12** Mandal, T.; Dey, A.; Seth, S.K.; Ortega-Castro, J.; Rheingold, A.L.; Ray, P.P.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Influence of 2-Amino-4-methylpyridine and 2-Aminopyrimidine Ligands on the Malonic Acid-Cu(II) System: Insights through Supramolecular Interactions and Photoresponse Properties. *Acs Omega*. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 2470-1343

DOI: <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b02971>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 4

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.512

Posición de publicación: 78

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 179

Citas: 4

- 13** García-Raso, A.; Terrón, A.; Ortega-Castro, J.; Barceló-Oliver, M.; Lorenzo, J.; Rodríguez-Calado, S.; Franconetti, A.; Frontera, A.; Vázquez-López, E.; Fiol, J.J. Iridium(III) coordination of N(6)modified adenine derivatives with amino acid chains. *Journal of Inorganic Biochemistry*. 205, pp. 111000. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 0162-0134

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 10

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.155

Posición de publicación: 129

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.155

Posición de publicación: 9

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 298

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 45

Citas: 7

- 14** Marino, L.; Ramis, R.; Casasnovas, R.; Ortega-Castro, J.; Casasnovas, R.; Vilanova, B.; Frau, J.; Adrover, M. Unravelling the effect of N(ϵ)-(carboxyethyl)lysine on the conformation, dynamics and aggregation propensity of α -synuclein. *Chemical Science*. 11, pp. 3332 - 3344. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2020. Disponible en Internet en: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2020/sc/d0sc00906g>>. ISSN 2041-6520

DOI: <https://doi.org/10.1039/d0sc00906g>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 4

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 9.825

Posición de publicación: 22

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 179

Citas: 11

- 15** Miquel Oliver; Miquel Adrover; Antonio Frontera; Joaquin Ortega-Castro; Manuel Miró. In-vitro prediction of the membranotropic action of emerging organic contaminants using a liposome-based multidisciplinary approach. Science of the Total Environment. 738 - 140096, pp. 1 - 12. (Holanda): Elsevier B.V., 2020. ISSN 0048-9697
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.140096>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/155932>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 4
Nº total de autores: 5
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: ENVIRONMENTAL SCIENCES
Índice de impacto: 7.963
Revista dentro del 25%: Si
Posición de publicación: 25
Num. revistas en cat.: 274
Fuente de citas: WOS
Citas: 4
- 16** Saha, D.; Gayen, S.; Maity, T.; Frontera, A.; Ortega-Castro, J.; Leus, K.; Wang, G.; Van Der Voort, P.; Brandão, P.; Koner, S. Combined experimental and computational studies on preferential CO₂ adsorption over a zinc-based porous framework solid. New Journal of Chemistry. 44 - 5, pp. 1806 - 1816. (Francia): 2020. ISSN 1144-0546
DOI: <https://doi.org/10.1039/c9nj04154k>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 5
Nº total de autores: 10
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Índice de impacto: 3.591
Revista dentro del 25%: No
Posición de publicación: 75
Num. revistas en cat.: 179
Fuente de citas: WOS
Citas: 4
- 17** Rafael Ramis; Joaquín Ortega-Castro; Bartolomé Vilanova; Miquel Adrover; Juan Frau. Unraveling the NaCl Concentration Effect on the First Stages of α -Synuclein Aggregation. Biomacromolecules. 21, pp. 5200 - 5212. (Estados Unidos de América): 2020. ISSN 1525-7797
DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.biomac.0c01292>
Tipo de producción: Artículo científico
Tipo de soporte: Revista
Posición de firma: 2
Autor de correspondencia: Si
Nº total de autores: 5
Categoría: BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Revista dentro del 25%: Si
Índice de impacto: 6.988
Num. revistas en cat.: 298
Posición de publicación: 51
Categoría: CHEMISTRY, ORGANIC
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Revista dentro del 25%: Si
Índice de impacto: 6.988
Num. revistas en cat.: 57
Posición de publicación: 5
Categoría: POLYMER SCIENCE
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Revista dentro del 25%: Si
Índice de impacto: 6.988
Num. revistas en cat.: 88
Posición de publicación: 5
Fuente de citas: WOS
Citas: 6
- 18** Ramis, R.; Casasnovas R.; Ortega-Castro, J.; Frau J.; Alvarez-Idaboy J.R.; Mora-Diez N. Modelling the repair of carbon-centred protein radicals by the antioxidants glutathione and Trolox. New Journal of Chemistry. 43, pp. 2085 - 2097. (Francia): 2019. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpca.7b10744?src=recsys>>. ISSN 1144-0546



DOI: <https://doi.org/10.1039/C8NJ05544K>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.288

Posición de publicación: 68

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 177

Citas: 4

- 19** Ramis, R.; Casasnovas, R.; Marino, L.; Frau, J.; Adrover, M.; Vilanova, B.; Mora-Diez, N.; Ortega-Castro, J.A density functional theory study of the free-radical scavenging activity of aminoguanidine. Comparison with its reactive carbonyl compound and metal scavenging activities. International Journal of Quantum Chemistry. 119 - 13, (Estados Unidos de América): 2019. ISSN 0020-7608

DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.25911>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 8

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.747

Posición de publicación: 118

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.747

Posición de publicación: 45

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.747

Posición de publicación: 25

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.747

Posición de publicación: 12

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 159

Categoría: MATHEMATICS, INTERDISCIPLINARY APPLICATIONS

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 106

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 37

Categoría: QUANTUM SCIENCE & TECHNOLOGY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 17

Citas: 4

- 20** Laura Mariño; Rodrigo Casasnovas; Rafael Ramis; Bartolomé Vilanova; Joaquín Ortega-Castro; Juan Frau; Miquel Adrover. Does glycation really distort the peptide α -helicity?. International Journal of Biological Macromolecules. 129, pp. 254 - 266. (Reino Unido): 2019. ISSN 0141-8130

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 5

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.162

Posición de publicación: 51

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 5.162

Posición de publicación: 10

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Tipo de soporte: Revista

Categoría: BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 297

Categoría: CHEMISTRY, APPLIED

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 71

Categoría: POLYMER SCIENCE



Índice de impacto: 5.162
Posición de publicación: 9

Fuente de citas: WOS

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 89

Citas: 7

- 21** Rafael Ramis; Joaquín Ortega-Castro; Rodrigo Casasnovas; Laura Mariño; Bartolomé Vilanova; Miquel Adrover; Juan Frau. A Coarse-grained molecular dynamics approach to the study of the intrinsically disordered protein α -synuclein. Journal Of Chemical Information And Modeling. 59 - 4, pp. 1458 - 1471. (Estados Unidos de América): 2019. ISSN 1549-9596

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jcim.8b00921>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.549

Posición de publicación: 49

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.549

Posición de publicación: 11

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.549

Posición de publicación: 28

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.549

Posición de publicación: 17

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 177

Categoría: CHEMISTRY, MEDICINAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 61

Categoría: COMPUTER SCIENCE, INFORMATION SYSTEMS

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 156

Categoría: COMPUTER SCIENCE, INTERDISCIPLINARY APPLICATIONS

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 109

Citas: 29

- 22** T. Mandal; S. Pathak; A. Dey; Md. M. Islam; S. K. Seth; A. Al Masum; J. Ortega-Castro; P. P. Ray; A. Frontera; S. Mukhopadhyay. Structure, Photo Response Properties and Biological Activity of Dicyano-substituted 4-Aryl-2-Pyridone Derivatives. Acs Omega. 4 - 4, pp. 7200 - 7212. (Estados Unidos de América): 2019. Disponible en Internet en: <<https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acsomega.9b00289>>. ISSN 2470-1343

DOI: <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b00289>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 7

Nº total de autores: 10

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.87

Posición de publicación: 81

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 177

Citas: 13

- 23** Mandal, T.; Dey, A.; Pathak, S.; Islam, Md. M.; Konar, S.; Ortega-Castro, J.; Seth, S. K.r; Ray, P. P.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Structures, photoresponse properties and DNA binding abilities of 4-(4-pyridinyl)-2-pyridone salts. Rsc Advances. 9, pp. 9663 - 9677. (Reino Unido): 2019. Disponible en Internet en: <<https://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2019/ra/c9ra00666d>>. ISSN 2046-2069

DOI: <https://doi.org/10.1039/c9ra00666d>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

**Posición de firma:** 7**Nº total de autores:** 10**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.119**Posición de publicación:** 73**Fuente de citas:** WOS**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 177**Citas:** 18

- 24** Humberto Martínez-Orozco; Laura Mariño; Ana Belén Uceda; Joaquín Ortega-Castro; Bartolomé Vilanova; Juan Frau; Miquel Adrover. Nitration and Glycation Diminish the α -Synuclein Role in the Formation and Scavenging of Cu²⁺-Catalyzed Reactive Oxygen Species. *Acs Chemical Neuroscience*. 10 - 6, pp. 2919 - 2930. (Estados Unidos de América): 2019. ISSN 1948-7193

DOI: <https://doi.org/10.1021/acscchemneuro.9b00142>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 5**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.486**Posición de publicación:** 77**Categoría:** BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 297**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.486**Posición de publicación:** 66**Categoría:** NEUROSCIENCES**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 271**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.486**Posición de publicación:** 12**Categoría:** CHEMISTRY, MEDICINAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 61**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 17

- 25** N. Hernández-Haro; J. Ortega-Castro; Y. B. Martynov, R. G. Nazmitdinov; A. Frontera. DFT prediction of band gap in organic-inorganic metal halide perovskites: An exchange-correlation functional benchmark study. *Chemical Physics*. 516, pp. 225 - 231. (Holanda): 2019. ISSN 0301-0104

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.chemphys.2018.09.023>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1.771**Posición de publicación:** 116**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 159**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1.771**Posición de publicación:** 23**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 37**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 60

- 26** Ghosh, K.; Sil, S.; Ray, P.P.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Photosensitive Schottky barrier diode behavior of a semiconducting Co(III)-Na complex with a compartmental Schiff base ligand. *Rsc Advances*. 9 - 60, pp. 34710 - 34719. (Reino Unido): 2019. ISSN 2046-2069

DOI: <https://doi.org/10.1039/C9RA06354D>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/152335>

**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 4**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.119**Posición de publicación:** 73**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 177**Citas:** 14

- 27** R. Ramis; J. Ortega-Castro; C. Caballero; R. Casasnovas; A. Cerrillo; B. Vilanova; M. Adrover; J. Frau. How does pyridoxamine inhibit the formation of advanced glycation end products? The role of its primary antioxidant activity. *Antioxidants*. 8, pp. 344. (Suiza): 2019. Disponible en Internet en: <<https://www.mdpi.com/2076-3921/8/9/344>>. ISSN 2076-3921

DOI: <https://doi.org/10.3390/antiox8090344>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 8**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 5.014**Posición de publicación:** 56**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 5.014**Posición de publicación:** 10**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 5.014**Posición de publicación:** 7**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Autor de correspondencia:** Si**Categoría:** BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 297**Categoría:** FOOD SCIENCE & TECHNOLOGY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 139**Categoría:** CHEMISTRY, MEDICINAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 61**Citas:** 24

- 28** Martínez, D.; Pérez, A.; Cañellas, S.; Silió, I.; Lancho, A.; García-Raso, A.; Fiol, J.J.; Terrón, A.; Barceló-Oliver, M.; Ortega-Castro, J.; Molins, E.; Frontera, A. Synthesis, reactivity, X-ray characterization and docking studies of N7/N9- (2-pyrimidyl)-adenine derivatives. *Journal of Inorganic Biochemistry*. 203, pp. 110879. (Estados Unidos de América): 2019. ISSN 0162-0134

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 10**Nº total de autores:** 12**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.155**Posición de publicación:** 147**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.155**Posición de publicación:** 10**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 297**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45**Citas:** 11

- 29** Hernández-Laguna, A.; Pérez del Valle, C.; Hernández-Haro, N.; Ortega-Castro, J.; Muñoz-Santiburcio, D.; Vidal, I.; Sánchez-Navas, A.; Escamilla-Roa, E.; Sainz-Díaz, C.I. Compressibility of 2M1 muscovite-phlogopite series minerals. *Journal of Molecular Modeling*. 25, pp. 341. (Alemania): 2019. ISSN 1610-2940

DOI: <https://doi.org/10.1007/s00894-019-4218-x>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista



Posición de firma: 4

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.346

Posición de publicación: 266

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.346

Posición de publicación: 58

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.346

Posición de publicación: 130

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.346

Posición de publicación: 85

Categoría: BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 297

Categoría: BIOPHYSICS

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 71

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 177

Categoría: COMPUTER SCIENCE,
INTERDISCIPLINARY APPLICATIONS

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 109

- 30** Konar, S.; Dey, A.; Ray, S.; Das, K.; Chatterjee, S.; Ray, P. P.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Two Zinc(II)-Based Metal Complexes of New Pyrimidine Derived Ligand: Anion-Dependent Structural Variations and Charge Transport Property Analysis. *Journal Of Physical Chemistry C*. 122, pp. 8724 - 8734. (Estados Unidos de América): 2018. ISSN 1932-7447

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b11579>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 7

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.309

Posición de publicación: 44

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.309

Posición de publicación: 60

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.309

Posición de publicación: 34

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 148

Categoría: MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 293

Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 94

Citas: 22

- 31** Purkayastha, A.; Debnath, D.; Majumder, M.; Ortega-Castro, J.; Kirillov, A. M.; Ganguly, R.; Klak, J.; Frontera, A.; Misra, T. K. Nickel(II) based homo- vs. heterometallic 1D coordination polymers derived from a novel 6-aminouracil building block: Structures, topologies, non-covalent interactions, magnetism, and antibacterial activity. *Inorganica Chimica Acta*. 482, pp. 384 - 394. (Suiza): 2018. ISSN 0020-1693

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ica.2018.06.037>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 4

Nº total de autores: 9

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.433

Posición de publicación: 16

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 45

Fuente de citas: WOS**Citas:** 10

- 32** Banerjee, S.; Dey, A.; Ghorai, P.; Brandao, P.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Ray, P. P.; Saha, A. Experimental and computational investigations of the photosensitive Schottky barrier diode property of an azobenzene based small organic molecule. *New Journal of Chemistry*. 42, pp. 13430 - 13441. (Francia): 2018. ISSN 1144-0546

DOI: <https://doi.org/10.1039/C8NJ02193G>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 5**Nº total de autores:** 8**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 3.069**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 67**Num. revistas en cat.:** 172**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 5

- 33** Hossain, A.; Dey, A.; Seth, S. K.; Ray, P. P.; Ballester, P.; Pritchard, R. G.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Mukhopadhyay, S. Enhanced Photosensitive Schottky Diode Behavior of Pyrazine over 2-Aminopyrimidine Ligand in Copper(II)-Phthalate MOFs: Experimental and Theoretical Rationalization. *Acs Omega*. 3, pp. 9160 - 9171. (Estados Unidos de América): 2018. ISSN 2470-1343

DOI: <https://doi.org/10.1021/acsomega.8b01111>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 7**Nº total de autores:** 9**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 2.584**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 76**Num. revistas en cat.:** 172**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 14

- 34** David Fernández; Joaquín Ortega-Castro; Juan Frau. Theoretical study of the deposition and adsorption of bisphosphonates on the 001 hydroxyapatite surface: Implications in the pathological crystallization inhibition and the bone antiresorptive action. *Applied Surface Science*. 392, pp. 204 - 214. (Holanda): 2017. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.apsusc.2016.09.029>>. ISSN 0169-4332

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 3**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Autor de correspondencia:** Si**Índice de impacto:** 3.387**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Posición de publicación:** 39**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 147**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** PHYSICS, APPLIED**Índice de impacto:** 3.387**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 25**Num. revistas en cat.:** 146**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** PHYSICS, CONDENSED MATTER**Índice de impacto:** 3.387**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 17**Num. revistas en cat.:** 67**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, COATINGS & FILMS**Índice de impacto:** 3.387**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 1**Num. revistas en cat.:** 19

**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 9

- 35** Halder, S.; Mondal, J.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Roy, P.A Ni-based MOF for selective detection and removal of Hg²⁺ in aqueous medium: a facile strategy. Dalton Transactions. 46, pp. 1943. (Reino Unido): 2017. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C6DT04722J>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 3**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.099**Posición de publicación:** 6**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45**Citas:** 101

- 36** D. Fernández; J. Ortega-Castro; J. Frau. Theoretical study of the HAP crystal growth inhibition potency of pyrophosphate, etidronate, citrate and phytate. Deciphered the adsorbed conformation of phytate on the HAP (001) surface. Applied Surface Science. 408, pp. 110 - 116. (Holanda): 2017. ISSN 0169-4332

Tipo de producción: Artículo científico**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 3**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.439**Posición de publicación:** 39**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.439**Posición de publicación:** 25**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.439**Posición de publicación:** 17**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.439**Posición de publicación:** 1**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Autor de correspondencia:** Si**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 147**Categoría:** PHYSICS, APPLIED**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 146**Categoría:** PHYSICS, CONDENSED MATTER**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 67**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, COATINGS & FILMS**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 19**Citas:** 10

- 37** D. Fernández; R. Ramis; J. Ortega-Castro; R. Casasnovas; B. Vilanova; J. Frau. New insights into human farnesyl pyrophosphate synthase inhibition by second-generation bisphosphonate drugs. Journal of Computer-Aided Molecular Design. 31, pp. 675 - 688. (Holanda): 2017. Disponible en Internet en: <<https://link.springer.com/article/10.1007%2Fs10822-017-0034-5>>. ISSN 0920-654X

DOI: <https://doi.org/10.1007/s10822-017-0034-5>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 3**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.356**Posición de publicación:** 186**Tipo de soporte:** Revista**Autor de correspondencia:** Si**Categoría:** BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 293



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.356
Posición de publicación: 40

Categoría: BIOPHYSICS
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 72

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.356
Posición de publicación: 41
Fuente de citas: WOS

Categoría: COMPUTER SCIENCE,
INTERDISCIPLINARY APPLICATIONS
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 105
Citas: 4

- 38** Laura Mariño; Carlos Andrés Maya- Aguirre; Kris Pauwels; Bartolomé Vilanova; Joaquín Ortega-Castro; Juan Frau; Josefa Donodo; Miquel Adrover. Glycation of Lysozyme by Glycolaldehyde Provides New Mechanistic Insights in Diabetes-Related Protein Aggregation. *Acs Chemical Biology*. 12 - 6, pp. 1152 - 2017. (Estados Unidos de América): 2017. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/ipdf/10.1021/acschembio.6b01103>>. ISSN 1554-8929

DOI: <https://doi.org/10.1021/acschembio.6b01103>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 5

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.592
Posición de publicación: 57

Categoría: BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 293

Fuente de citas: WOS

Citas: 17

- 39** Kariem, M.; Yawer, M.; Kumar, M.; Sheikh, H. N.; Sood, P.; Frontera, A.; Ortega-Castro, J. Supramolecular coordination polymers of La(III), Ce(III), Sm(III), Gd(III) and Eu(III) decorated with rigid 5-hydroxy-1,3-benzenedicarboxylate and flexible hexane-1,6-dicarboxylate linkers: Syntheses, structures, DFT study, luminescence and magnetic properties. *Polyhedron*. 134, pp. 153 - 165. (Reino Unido): 2017. ISSN 0277-5387

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.poly.2017.06.014>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

Posición de firma: 7

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.067
Posición de publicación: 18

Categoría: CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 45

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.067
Posición de publicación: 14

Categoría: CRYSTALLOGRAPHY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 26

Fuente de citas: WOS

Citas: 4

- 40** B. Vilanova; D. Fernández; R. Casasnovas; A. M. Pomar; J. R. Alvarez-Idaboy; N. Hernández-Haro; A. Grand; M. Adrover; J. Donoso; J. Frau; F. Muñoz; J. Ortega-Castro. Formation mechanism of glyoxal-DNA adduct, a DNA cross-link precursor. *International Journal of Biological Macromolecules*. 98, pp. 664 - 675. (Reino Unido): 2017. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0141813016319936>>. ISSN 0141-8130

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2017.01.040>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148052>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

**Posición de firma:** 12**Nº total de autores:** 12**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.909**Posición de publicación:** 79**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.909**Posición de publicación:** 9**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.909**Posición de publicación:** 10**Fuente de citas:** WOS**Categoría:** BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 293**Categoría:** CHEMISTRY, APPLIED**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 72**Categoría:** POLYMER SCIENCE**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 87**Citas:** 10

- 41** Ramis, R.; Ortega-Castro, J.; Vilanova, B.; Adrover, M.; Frau, J. Copper(II) binding sites in N-terminally acetylated α -synuclein: a theoretical rationalization. *Journal of Physical Chemistry A*. 121, pp. 5711 - 5719. (Estados Unidos de América): 2017. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.7b03165>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.836**Posición de publicación:** 69**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.836**Posición de publicación:** 14**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Autor de correspondencia:** Si**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 147**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 37**Citas:** 13

- 42** Halder, S.; Dey, A.; Bhattacharjee, A.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Ray, P. P.; Roy, P. A Cd(II)-based MOF as a photosensitive Schottky diode: experimental and theoretical studies. *Dalton Transactions*. 46, pp. 11239 - 11249. (Reino Unido): 2017. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7DT02184D>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 4**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.099**Posición de publicación:** 6**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45**Citas:** 51

- 43** Ramis, R.; Ortega-Castro, J.; Vilanova, B.; Adrover, M.; Frau, J. A Systematic DFT study of some plausible Zn(II) and Al(III) interaction sites in N-terminally acetylated α -synuclein. *Journal of Physical Chemistry A*. 122 - 2, pp. 690 - 699. (Estados Unidos de América): 2017. Disponible en Internet en: <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpca.7b10744?src=recsys>. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.7b10744>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista

**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.836**Posición de publicación:** 69**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.836**Posición de publicación:** 14**Fuente de citas:** WOS**Autor de correspondencia:** Si**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 147**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 37**Citas:** 9

- 44** Ghorai, P.; Dey, A.; Brandao, P.; Ortega-Castro, J.; Bauza, A.; Frontera, A.; Ray, P.P.; Saha, A. The development of a promising photosensitive Schottky barrier diode using a novel Cd(II) based coordination polymer. Dalton Transactions. 46, pp. 13531 - 13543. (Reino Unido): 2017. ISSN 1477-9226

DOI: <https://doi.org/10.1039/C7DT02535A>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 4**Nº total de autores:** 8**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.099**Posición de publicación:** 6**Fuente de citas:** WOS**Categoría:** CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 45**Citas:** 38

- 45** Subrata Jana, S.; Chandra Santra, R.; Frontera, A.; Drew, M. G. B.; Ortega-Castro, J.; Fernández, D.; Das, S.; Chattopadhyay, S. Copper(II) pseudohalide complexes with isomeric N2O donor Schiff base ligands: Synthesis, characterization and molecular dynamics simulations of interactions with DNA. Chemistryselect. 1 - 3, pp. 448 - 455. (Alemania): 2016. ISSN 2365-6549

Tipo de producción: Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 5**Nº total de autores:** 8**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:****Posición de publicación:** 165**Fuente de citas:** WOS**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 166**Citas:** 7

- 46** N. Hernández-Haro; D. Muñoz-Santiburcio; C. Pérez del Valle; J. Ortega-Castro; C. I. Sainz-Díaz; C. J. Garrido; A. Hernández-Laguna. Compressibility of 2M1 muscovite-paragonite series minerals: A computational study to 6 GPa. American Mineralogist. 101 - 5, pp. 1207 - 1216. (Estados Unidos de América): 2016. ISSN 0003-004X

DOI: <https://doi.org/10.2138/am-2016-5407>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 4**Nº total de autores:** 7**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.021**Posición de publicación:** 10**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.021**Categoría:** MINERALOGY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 29**Categoría:** GEOCHEMISTRY & GEOPHYSICS**Revista dentro del 25%:** No

**Posición de publicación:** 39**Num. revistas en cat.:** 84**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 2

- 47** Halder, S.; Dey, A.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Ray, P. P.; Roy, P. Irradiation Specified Conformational Change in a Small Organic Compound and Its Effect on Electrical Properties. *Journal Of Physical Chemistry C*. 120 - 44, pp. 25557 - 25563. (Estados Unidos de América): 2016. ISSN 1932-7447

DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b10081>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 3**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Índice de impacto:** 4.536**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 31**Num. revistas en cat.:** 146**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Índice de impacto:** 4.536**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 43**Num. revistas en cat.:** 275**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY**Índice de impacto:** 4.536**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 25**Num. revistas en cat.:** 87**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 15

- 48** Solis-Calero, C.; Ortega-Castro, J.; Hernández-Laguna, A.; Frau, J.; Muñoz, F. A DFT study of the carboxymethyl-phosphatidylethanolamine formation from glyoxal and phosphatidylethanolamine surface. Comparison with the formation of N(eps)-(carboxymethyl)lysine from glyoxal and L-lysine. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 17, pp. 8210 - 8222. (Reino Unido): 2015. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/C4CP05360E>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148356>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Índice de impacto:** 4.449**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 32**Num. revistas en cat.:** 144**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Índice de impacto:** 4.449**Revista dentro del 25%:** Si**Posición de publicación:** 6**Num. revistas en cat.:** 35**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 5

- 49** Solis-Calero, C.; Ortega-Castro, J.; Frau, J.; Muñoz, F. Scavenger Mechanism of Methylglyoxal by Metformin. A DFT Study. *Theoretical Chemistry Accounts*. 134, pp. 48. (Alemania): 2015. Disponible en Internet en: <http://link.springer.com/article/10.1007/s00214-015-1649-z>. ISSN 1432-881X

DOI: <https://doi.org/10.1007/s00214-015-1649-z>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148034>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 2

**Nº total de autores:** 4**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1.806**Posición de publicación:** 92**Fuente de citas:** WOS**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 144**Citas:** 14

- 50** Fernández, D.; Ortega-Castro, J.; Mariño, L.; Perelló, J.; Frau, J. Mechanistic insights into protonation state as a critical factor in hFPPS enzyme inhibition. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*. 29, pp. 667 - 680. (Holanda): 2015. ISSN 0920-654X

DOI: <https://doi.org/10.1007/s10822-015-9853-4>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.199**Posición de publicación:** 113**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.199**Posición de publicación:** 21**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 289**Categoría:** BIOPHYSICS**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 72**Índice de impacto:** 3.199**Posición de publicación:** 13**Fuente de citas:** WOS**Categoría:** COMPUTER SCIENCE,
INTERDISCIPLINARY APPLICATIONS**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 104**Citas:** 2

- 51** Roy, S.; Dey, A.; Ray, P.P.; Ortega-Castro, J.; Frontera, A.; Chattopadhyay, S. Application of a novel 2D cadmium(II)-MOF in the formation of a photo-switch with substantial on off ratio. *Chemical Communications*. pp. 12974 - 12976. (Reino Unido): Royal Society of Chemistry, 2015. Disponible en Internet en: <http://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2015/cc/c5cc04323a?page=search>. ISSN 1359-7345

DOI: <https://doi.org/10.1039/C5CC04323A>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/147501>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 4**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 6.567**Posición de publicación:** 21**Fuente de citas:** WOS**Categoría:** CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 163**Citas:** 84

- 52** Solís Calero, C.; Ortega Castro, J.; Hernández Laguna, A.; Muñoz, F. DFT study of the mechanism of the reaction of aminoguanidine with methylglyoxal. *Journal of Molecular Modeling*. 20 - 4, pp. 2202. (Alemania): 2014. Disponible en Internet en: <http://link.springer.com/article/10.1007/s00894-014-2202-z>. ISSN 1610-2940

DOI: <https://doi.org/10.1007/s00894-014-2202-z>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148489>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 4



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.736
Posición de publicación: 224

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.736
Posición de publicación: 52

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.736
Posición de publicación: 66

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.736
Posición de publicación: 34

Fuente de citas: WOS

Categoría: BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 290

Categoría: BIOPHYSICS
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 73

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 157

Categoría: COMPUTER SCIENCE,
INTERDISCIPLINARY APPLICATIONS
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 102

Citas: 13

- 53** Erika J. Palin; Martin T. Dove; Simon A. T. Redfern; Joaquín Ortega-Castro; Claro Ignacio Sainz-Díaz; Alfonso Hernández-Laguna. Computer simulations of cations order-disorder in 2:1 dioctahedral phyllosilicates using cation-exchange potentials and monte carlo methods. International Journal of Quantum Chemistry. 114 - 19, pp. 1257 - 1286. (Estados Unidos de América): 2014. Disponible en Internet en: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/qua.24703/pdf>>. ISSN 0020-7608

DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.24703>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 4

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.432
Posición de publicación: 97

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.432
Posición de publicación: 32

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.432
Posición de publicación: 23

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 139

Categoría: MATHEMATICS, INTERDISCIPLINARY
APPLICATIONS
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 99

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR &
CHEMICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 34

Citas: 11

- 54** N. Hernández-Haro; J. Ortega-Castro; M. Pruneda; C.I. Sainz-Díaz; A. Henández-Laguna. Theoretical study on the influence of the Mg²⁺ and Al³⁺ octahedral cations on the vibrational spectra of the hydroxy groups of dioctahedral 2:1 phyllosilicate models. Journal of Molecular Modeling. 20 - 9, pp. 2402. (Alemania): 2014. ISSN 1610-2940

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.736
Posición de publicación: 224

Tipo de soporte: Revista

Categoría: BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 290



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.736
Posición de publicación: 52

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.736
Posición de publicación: 66

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.736
Posición de publicación: 34

Fuente de citas: WOS

Categoría: BIOPHYSICS
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 73

Categoría: CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 157

Categoría: COMPUTER SCIENCE,
 INTERDISCIPLINARY APPLICATIONS
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 102

Citas: 5

- 55** Hernández-Haro, N.; Ortega-Castro, J.; Pérez del Valle, C.; Muñoz-Santiburcio, D.; Sainz-Díaz, C.I.; Hernández-Laguna, A. Computational study of elastic behaviour of the 2M1 Muscovite-Paragonite series. American Mineralogist. 98 - 4, pp. 651 - 664. (Estados Unidos de América): 2013. Disponible en Internet en: <<http://ammin.geoscienceworld.org/content/98/4/651.abstract>>. ISSN 0003-004X

DOI: <https://doi.org/10.2138/am.2013.4094>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.059
Posición de publicación: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.059
Posición de publicación: 33

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: MINERALOGY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 27

Categoría: GEOCHEMISTRY & GEOPHYSICS
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 79

Citas: 13

- 56** Casasnovas, R.; Frau, J.; Ortega-Castro, J.; Donoso, J.; Muñoz, F. C-H Activation in Pyridoxal-5'-phosphate and Pyridoxamine-5'-Phosphate Schiff Bases: Effect of metal chelation. A Computational Study. Journal of Physical Chemistry B. 117 - 8, pp. 2339 - 2347. (Estados Unidos de América): 2013. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp311861p?prevSearch=casasnovas&searchHistoryKey=>>>. ISSN 1520-6106

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp311861p>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148531>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.377
Posición de publicación: 39

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 136

Citas: 18

- 57** Solís-Calero, C.; Ortega-Castro, J.; Hernández-Laguna, A.; Muñoz, F. A DFT Study of the Amadori rearrangement above a Phosphatidylethanolamine surface : Comparison to reactions in aqueous environment. Journal Of Physical Chemistry C. 117, pp. 8299 - 8309. (Estados Unidos de América): 2013. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/jp401488j>>. ISSN 1932-7447

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp401488j>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148329>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.835

Posición de publicación: 29

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.835

Posición de publicación: 29

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.835

Posición de publicación: 19

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 136

Categoría: MATERIALS SCIENCE,
MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 251

Categoría: NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 73

Citas: 11

- 58** Casasnovas, R.; Ortega-Castro, J.; Donoso, J.; Frau, J.; Muñoz, F. Theoretical calculations of stability constants and pKa values of metal complexes in solution: application to pyridoxamine- copper(II) complexes and their biological implications in AGE inhibition. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 15, pp. 16303 - 16313. (Reino Unido): 2013. Disponible en Internet en: <<http://pubs.rsc.org/en/content/articlepdf/2013/cp/c3cp50840d>>. ISSN 1463-9076

DOI: <https://doi.org/10.1039/C3CP50840D>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148330>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.198

Posición de publicación: 33

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.198

Posición de publicación: 5

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 136

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR &
CHEMICAL

Revista dentro del 25%: Si

Num. revistas en cat.: 33

Citas: 36

- 59** Fernández, D.; Ortega-Castro, J.; Frau, J. Human Farnesyl Pyrophosphate Synthase inhibition by Nitrogen Bisphosphonates: a 3D-QSAR study. *Journal of Computer-Aided Molecular Design*. 27 - 8, pp. 739 - 754. (Holanda): 2013. Disponible en Internet en: <http://download.springer.com/static/pdf/652/art%253A10.1007%252Fs10822-013-9674-2.pdf?auth66=1384084423_711ca2e69432558803e28869a361033f&ext=.pdf>. ISSN 0920-654X

DOI: <https://doi.org/10.1007/s10822-013-9674-2>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.782

Posición de publicación: 152

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Tipo de soporte: Revista

Categoría: BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 291

Categoría: BIOPHYSICS



Índice de impacto: 2.782
Posición de publicación: 34

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.782
Posición de publicación: 13

Fuente de citas: WOS

Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 74

Categoría: COMPUTER SCIENCE,
 INTERDISCIPLINARY APPLICATIONS

Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 102

Citas: 15

- 60** Vilanova, B.; Gallardo, J.M.; Caldés, C.; Adrover, M.; Ortega-Castro, J.; Muñoz, F.; Donoso, J. Formation of Schiff bases of O-phosphorylethanolamine and O-phospho-D,L-serine with pyridoxal 5'-phosphate. Experimental and theoretical studies. Journal of Physical Chemistry A. 116 - 8, pp. 1897 - 1905. (Estados Unidos de América): 2012. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp2116033>>. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp2116033>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148032>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 5

Nº total de autores: 7

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.771

Posición de publicación: 50

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.771

Posición de publicación: 10

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 135

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR &
 CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 34

Citas: 20

- 61** Ortega-Castro, J.; Frau, J.; Casasnovas, R.; Fernandez, D.; Donoso, J.; Muñoz, F. High- and low-spin Fe(III) complexes of various AGE inhibitors. Journal of Physical Chemistry A. 116 - 11, pp. 2961 - 2971. (Estados Unidos de América): 2012. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp210188w>>. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp210188w>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148031>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 1

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.771

Posición de publicación: 50

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.771

Posición de publicación: 10

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 135

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR &
 CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 34

Citas: 19

- 62** Casasnovas, R.; Adrover, M.; Ortega-Castro, J.; Frau, J.; Donoso, J.; Muñoz, F. C-H Activation in Pyridoxal-5'-phosphate Schiff Bases: The Role of the Imine Nitrogen. A Combined Experimental and Computational Study. Journal of Physical Chemistry B. 116 - 35, pp. 10665 - 10675. (Estados Unidos de América): 2012. Disponible en Internet en: <<http://www.springerlink.com/content/kj560506k2p85w57/>>. ISSN 1520-6106



DOI: <https://doi.org/10.1021/jp303678n>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148568>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 3

Nº total de autores: 6

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.607

Posición de publicación: 35

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 135

Citas: 33

- 63** Solís-Calero, C.; Ortega-Castro, J.; Hernández-Laguna, A.; Muñoz, F. A comparative DFT study of the Schiff base formation from acetaldehyde and butylamine, glycine and phosphatidylethanolamine. *Theoretical Chemistry Accounts*. 131, pp. 1263. (Alemania): 2012. Disponible en Internet en: http://download.springer.com/static/pdf/912/art%253A10.1007%252Fs00214-012-1263-2.pdf?auth66=1355328230_7d54c5a33d37f28da6279d5ef9568ad7&ext=.pdf. ISSN 1432-881X

DOI: <https://doi.org/10.1007/s00214-012-1263-2>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.233

Posición de publicación: 63

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 135

Citas: 16

- 64** Pineda, F.P.; Ortega-Castro, J.; Alvarez-Idaboy, J.R.; Frau, J.; Cabrera, B.M.; Ramírez, J.C.; Donoso, J.; Muñoz, F. Hydrolysis of a chlorambucil analogue. A DFT study. *Journal of Physical Chemistry A*. 115, pp. 2359 - 2366. (Estados Unidos de América): 2011. Disponible en Internet en: <http://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp111202p>. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp111202p>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148296>

Tipo de producción: Artículo científico

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 8

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.950

Posición de publicación: 46

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.950

Posición de publicación: 9

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 129

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 33

Citas: 19

- 65** Casasnovas, R.; Fernández, D.; Ortega-Castro, J.; Frau, J.; Donoso, J.; Muñoz, F. Avoiding gas-phase calculations in theoretical pKa predictions. *Theoretical Chemistry Accounts*. 130, pp. 1 - 13. (Alemania): 2011. Disponible en Internet en: <http://www.springerlink.com/content/kj560506k2p85w57/>. ISSN 1432-881X

DOI: <https://doi.org/10.1007/s00214-011-0945-5>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148298>

Tipo de producción: Artículo científico

Tipo de soporte: Revista

**Posición de firma:** 3**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.160**Posición de publicación:** 63**Fuente de citas:** WOS**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 129**Citas:** 73

- 66** Muñoz-Santiburcio, D.; Ortega-Castro, J.; Huertas, F.J.; Hernández-Laguna, A. Influence of the exchangeable cation on the adsorption of 2-nitro-1-propanol on smectites surface models. Chemical Physics Letters. 515, pp. 49 - 55. (Holanda): 2011. Disponible en Internet en: <http://ac.els-cdn.com/S0009261411011080/1-s2.0-S0009261411011080-main.pdf?_tid=6b38bbde-4867-11e3-8adb-00000aacb360&acdnat=1383909657_97db642592c4cf54>. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2011.09.016>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 4**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.34**Posición de publicación:** 56**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 129**Índice de impacto:** 2.34**Posición de publicación:** 12**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 33**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 3

- 67** Solís Calero, C.; Ortega Castro, J.; Muñoz, F. DFT Study on Amino-Phospholipids Surface Mediated Decomposition of Hydrogen Peroxide. Journal Of Physical Chemistry C. 115, pp. 22945 - 22953. (Estados Unidos de América): 2011. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/jp2064134>>. ISSN 1932-7447

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp2064134>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148353>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 3**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.810**Posición de publicación:** 26**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 129**Índice de impacto:** 4.810**Posición de publicación:** 23**Categoría:** MATERIALS SCIENCE, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si**Num. revistas en cat.:** 230**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 4.810**Posición de publicación:** 17**Categoría:** NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 66**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 8



- 68** Casasnovas, R.; Frau, J.; Ortega-Castro, J.; Salvà, A.; Donoso, J.; Muñoz, F. Simplification of the CBS-QB3 Method for Predicting Gas-Phase Deprotonation Free Energies. *International Journal of Quantum Chemistry*. 110, pp. 323 - 330. (Estados Unidos de América): 2010. ISSN 0020-7608
DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.22170>
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148533>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 3
Nº total de autores: 6
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.315
Posición de publicación: 87
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.315
Posición de publicación: 29
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.315
Posición de publicación: 23
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 125
Categoría: MATHEMATICS, INTERDISCIPLINARY APPLICATIONS
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 92
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 32
Citas: 40
- 69** Ortega-Castro, J.; Hernández-Haro N.; Timón V.; Sainz-Díaz C.I.; Hernández-Laguna A. High-pressure behaviour of 2M1 muscovite. *American Mineralogist*. 95, pp. 249 - 259. (Estados Unidos de América): 2010. Disponible en Internet en: <http://www.minsocam.org/MSA/AmMin/TOC/Abstracts/2010_Abtracts/FM10_Abtracts/Ortega-Castro_p249_10.pdf>. ISSN 0003-004X
DOI: <https://doi.org/10.2138/am.2010.3035>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 1
Nº total de autores: 5
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.859
Posición de publicación: 7
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.859
Posición de publicación: 27
Fuente de citas: WOS
Tipo de soporte: Revista
Categoría: MINERALOGY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 27
Categoría: GEOCHEMISTRY & GEOPHYSICS
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 77
Citas: 20
- 70** Ortega-Castro, J.; Hernández-Haro, N.; Dove, M.T.; Hernández-Laguna, A.; Sainz-Díaz, C.I. DFT and Monte Carlo study of octahedral cation ordering of Al/Fe/Mg cations in dioctahedral 2:1 phyllosilicates. *American Mineralogist*. 95, pp. 209 - 220. (Estados Unidos de América): 2010. Disponible en Internet en: <http://www.minsocam.org/MSA/AmMin/TOC/Abstracts/2010_Abtracts/FM10_Abtracts/Ortega-Castro_p209_10.pdf>. ISSN 0003-004X
DOI: <https://doi.org/10.2138/am.2010.3273>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 1
Nº total de autores: 5
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.026
Posición de publicación: 7
Tipo de soporte: Revista
Categoría: MINERALOGY
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 27

**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.026**Posición de publicación:** 27**Fuente de citas:** WOS**Categoría:** GEOCHEMISTRY & GEOPHYSICS**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 77**Citas:** 33

- 71** Ortega-Castro, J.; Adrover, M.; Frau, J.; Salvà, A.; Donoso, J.; Muñoz, F. DFT Studies on Schiff Base Formation on Vitamin B6 analogues. Reaction between a pyridoxamine-analogue and carbonyl compounds. Journal of Physical Chemistry A. 114, pp. 4634 - 4640. (Estados Unidos de América): 2010. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp909156m>>. ISSN 1089-5639

DOI: <https://doi.org/10.1021/JP909156M>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148206>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 1**Nº total de autores:** 6**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.732**Posición de publicación:** 48**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 2.732**Posición de publicación:** 9**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 125**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 32**Citas:** 59

- 72** Solís-Calero, C.; Ortega-Castro, J.; Muñoz, F. Reactivity of a Phospholipid Monolayer Model under Periodic Boundary Conditions. A DFT Study of the Schiff base formation between Phosphatidylethanolamine and Acetaldehyde. Journal of Physical Chemistry B. 114, pp. 15879 - 15885. (Estados Unidos de América): 2010. Disponible en Internet en: <<http://pubs.acs.org/doi/pdfplus/10.1021/jp1088367>>. ISSN 1520-6106

DOI: <https://doi.org/10.1021/jp1088367>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148537>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 2**Nº total de autores:** 3**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.603**Posición de publicación:** 32**Fuente de citas:** WOS**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No**Num. revistas en cat.:** 125**Citas:** 19

- 73** Ortega-Castro, J.; Hernández-Haro, N.; Muñoz-Santiburcio, D.; Hernández-Laguna, A.; Sainz-Díaz, C. I. Crystal structure and hydroxyl group vibrational frequencies of phyllosilicates by DFT methods. Journal of Molecular Structure-Theochem. 912, pp. 82 - 87. (Holanda): 2009. Disponible en Internet en: <http://ac.els-cdn.com/S0166128009001158/1-s2.0-S0166128009001158-main.pdf?_tid=d76e8e50-4862-11e3-b893-00000aacc361&acdnat=1383907691_7dc9094ffeac84f5>. ISSN 0166-1280

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.theochem.2009.02.013>**Tipo de producción:** Artículo científico**Posición de firma:** 1**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 1.216**Tipo de soporte:** Revista**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Revista dentro del 25%:** No

**Posición de publicación:** 85**Num. revistas en cat.:** 121**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 25

- 74** Ortega-Castro, J.; Muñoz, F.; Donoso, J.; Frau, J. Cu²⁺ complexes of some AGE inhibitors. *Chemical Physics Letters*. 475, pp. 277 - 284. (Holanda): 2009. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S000926140900654X>>. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/J.CPLETT.2009.05.074>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/148574>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 1**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Índice de impacto:** 2.291**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 51**Num. revistas en cat.:** 121**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Índice de impacto:** 2.291**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 12**Num. revistas en cat.:** 33**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 30

- 75** Ortega-Castro, J.; Adrover, M.; Frau, J.; Donoso, J.; Muñoz, F. Erratum to 'Chelating power of LR-74, a new AGE-inhibitor'. *Chemical Physics Letters*. 470 - 4-6, pp. 367 - 368. (Holanda): 2009. ISSN 0009-2614

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2009.01.081>**Handle:** <http://hdl.handle.net/11201/152239>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 1**Nº total de autores:** 5**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** CHEMISTRY, PHYSICAL**Índice de impacto:** 2.291**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 51**Num. revistas en cat.:** 121**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL**Índice de impacto:** 2.291**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 12**Num. revistas en cat.:** 33

- 76** Ortega-Castro, J.; Hernández-Haro, N.; Hernández-Laguna, A.; Sainz-Díaz, C. I. DFT calculation of crystallographic properties of dioctahedral 2:1 phyllosilicates. *Clay Minerals*. 43, pp. 351 - 361. (Reino Unido): 2008. ISSN 0009-8558

DOI: <https://doi.org/10.1180/claymin.2008.043.3.02>**Tipo de producción:** Artículo científico**Tipo de soporte:** Revista**Posición de firma:** 1**Nº total de autores:** 4**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Categoría:** MINERALOGY**Índice de impacto:** 0.500**Revista dentro del 25%:** No**Posición de publicación:** 21**Num. revistas en cat.:** 25**Fuente de citas:** WOS**Citas:** 30



- 77** Ortega-Castro, J.; Adrover, M.; Frau, J.; Donoso, J.; Muñoz, F. Chelating power of LR-74, a new AGE-inhibitor. *Chemical Physics Letters*. 465, pp. 120 - 125. (Holanda): 2008. Disponible en Internet en: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0009261408012797>>. ISSN 0009-2614
Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148207>
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 1
Nº total de autores: 5
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.169
Posición de publicación: 47
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.169
Posición de publicación: 11
Fuente de citas: WOS
- Tipo de soporte:** Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 113
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 31
Citas: 12
- 78** Vicente Timón; Carlos Ayora; Manuel Cobán; Noemí Hernández Haro; Joaquín Ortega-Castro; Alfonso Hernández-Laguna. Aproximación Teórica sobre la Energética de la Estabilidad en Estructuras de Schwertmannita. *Revista de la Sociedad Española de Mineralogía*. 8, pp. 241 - 242. (España): 2008.
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 5
Nº total de autores: 6
Tipo de soporte: Revista
- 79** Timon, V.; Hernández-Haro, N.; Ortega-Castro, J.; Hernández Laguna, A.; Sáinz Díaz, I. Estudio ab initio de la Influencia de las Sustituciones Isomórficas de Ge y Ga en la Estructura de Bandas de Filosilicatos 2:1 Dioctaédricos. *Revista de la Sociedad Española de Mineralogía*. 8, pp. 243 - 244. (España): 2008.
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 3
Nº total de autores: 5
Tipo de soporte: Revista
- 80** Ortega-Castro, J.; Alfonso-Méndez, L.; Otto, P.; Hernández-Laguna, A. Soft Coulomb Hole method applied to molecules. *International Journal of Quantum Chemistry*. 107, pp. 1046 - 1059. (Estados Unidos de América): 2007. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo científico
Posición de firma: 0
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.368
Posición de publicación: 68
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.368
Posición de publicación: 15
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 1.368
Posición de publicación: 18
- Tipo de soporte:** Revista
Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 110
Categoría: MATHEMATICS, INTERDISCIPLINARY APPLICATIONS
Revista dentro del 25%: Si
Num. revistas en cat.: 74
Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: No
Num. revistas en cat.: 32



- 81** Solis Calero, C.; Ortega Castro, J.; Frau Munar, J.; Muñoz Izquierdo, F. Nonenzymatic reactions above phospholipid surfaces of biological membranes. Reactivity of phospholipids and their oxidation derivatives. *Oxidative Medicine And Cellular Longevity*. 2015 - 319505, (Estados Unidos de América): Hindawi Publishing Corporation, 2015. Disponible en Internet en: <<http://www.hindawi.com/journals/omcl/2015/319505/>>. ISSN 1942-0900

DOI: <https://doi.org/10.1155/2015/319505>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/1554>

Tipo de producción: Review

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 4

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 4.492

Posición de publicación: 53

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Autor de correspondencia: Si

Categoría: CELL BIOLOGY

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 187

Citas: 22

- 82** Casasnovas, R.; Ortega-Castro, J.; Frau, J.; Donoso, J.; Muñoz, F. Theoretical pKa Calculations With Continuum Model Solvents, Alternative Protocols to Thermodynamic Cycles. *International Journal of Quantum Chemistry*. 114, pp. 1350 - 1363. (Estados Unidos de América): 2014. Disponible en Internet en: <<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/qua.24699/pdf>>. ISSN 0020-7608

DOI: <https://doi.org/10.1002/qua.24699>

Handle: <http://hdl.handle.net/11201/148563>

Tipo de producción: Review

Posición de firma: 2

Nº total de autores: 5

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.432

Posición de publicación: 97

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.432

Posición de publicación: 32

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 1.432

Posición de publicación: 23

Fuente de citas: WOS

Tipo de soporte: Revista

Categoría: CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 139

Categoría: MATHEMATICS, INTERDISCIPLINARY APPLICATIONS

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 99

Categoría: PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Num. revistas en cat.: 34

Citas: 100

Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **Título del trabajo:** The Effects of α -synuclein glycation on its structure and dynamics revealed by coarse-grained replica-exchange molecular dynamics simulations

Nombre del congreso: XXXVII Reunión Bienal de la RSEQ

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Nacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: España

Fecha de celebración: 2019

Fecha de finalización: 2019

Tipo de entidad: Organizaciones No Gubernament.



Entidad organizadora: Real Sociedad española de Química (RSEQ)

Rafael Ramis; Joaquín Ortega-Castro; Rodrigo Casasnovas; Laura Mariño; Bartolomé Vilanova; Miquel Adrover; Juan Frau.

- 2 Título del trabajo:** The Effects of α -synuclein glycation on its structure and dynamics revealed by coarse-grained replica-exchange molecular dynamics simulations

Nombre del congreso: Theoretical Chemistry and Computational Modelling: 20 years promoting Excellence in Science

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: España

Fecha de celebración: 2019

Fecha de finalización: 2019

Rafael Ramis; Joaquín Ortega-Castro; Rodrigo Casasnovas; Laura Mariño; Bartolomé Vilanova; Miquel Adrover; Juan Frau.

- 3 Título del trabajo:** PEGylation of inositol hexaphosphate (InsP6) decreases its binding affinity for hydroxyapatite and its capacity to inhibit plasma calcification in vitro

Nombre del congreso: Congrés anual organitzat per la American Society of Nephrology. Kidney Week 2019

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Washington, Estados Unidos de América

Fecha de celebración: 2019

Fecha de finalización: 2019

Pérez, M.M.; Ferrer, M.D.; Ortega-Castro, J.; Bassissi, F.; Perelló, J.; Salcedo C.

- 4 Título del trabajo:** Shedding light on the effects of glycation on the protein structure.

Nombre del congreso: AILM 2019

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Francia

Fecha de celebración: 2019

Fecha de finalización: 2019

Laura Mariño; Rodrigo Casasnovas; Rafael Ramis; Bartomeu Vilanova; Juan Frau; Joaquín Ortega-Castro; Miquel Adrover.

- 5 Título del trabajo:** Modelling the repair of damaged proteins by antioxidants

Nombre del congreso: 24th IUPAC International Conference on Physical Organic Chemistry (ICPOC)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Faro, Portugal

Fecha de celebración: 2018

Fecha de finalización: 2018

Rafael Ramis; Rodrigo Casasnovas; Joaquín Ortega-Castro; Juan Frau; J. Raúl Álvarez-Idaboy; Nelaine Mora Diez.

- 6 Título del trabajo:** Modelling the repair of damaged proteins by antioxidants

Nombre del congreso: 28th Canadian Symposium on Theoretical and Computational Chemistry (CSTCC)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster



Ciudad de celebración: Windsor, Canadá

Fecha de celebración: 2018

Fecha de finalización: 2018

Rafael Ramis; Rodrigo Casasnovas; Joaquín Ortega-Castro; Juan Frau; J. Raúl Álvarez-Idaboy; Nelaine Mora Diez.

- 7 Título del trabajo:** Mandatory tutorial plan. A proposal against the disconnection of the teaching-learning process

Nombre del congreso: 10th annual International Conference on Education and New Learning Technologies

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Palma, España

Fecha de celebración: 2018

Fecha de finalización: 2018

R. Ramis; R. Casasnovas; L. Mariño; N. Hernández-Haro; J. Ortega-Castro.

- 8 Título del trabajo:** Modelling the repair of damaged proteins by antioxidants

Nombre del congreso: 11th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Toledo, España

Fecha de celebración: 2018

Fecha de finalización: 2018

Entidad organizadora: Universidad Autónoma de Madrid

R. Ramis; R. Casasnovas; J. Ortega-Castro; J. Frau; J.R. Álvarez-Idaboy; N. Mora-Diez.

- 9 Título del trabajo:** Exploring the dynamics of alpha-synuclein with replica exchange coarse grained molecular dynamics simulations

Nombre del congreso: 11th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Toledo, España

Fecha de celebración: 2018

Fecha de finalización: 2018

Entidad organizadora: Universidad Autónoma de Madrid

J. Ortega-Castro; R. Ramis; B. Vilanova; M. Adrover; J. Frau.

- 10 Título del trabajo:** Modelling the repair of damaged proteins by antioxidants

Nombre del congreso: 28 th Canadian Symposium on Theoretical and Computational Chemistry (15-19 July)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

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

Ciudad de celebración: Windsor, Ontario, Canadá

Fecha de celebración: 2018

Fecha de finalización: 2018

Entidad organizadora: Canadian Association of Theoretical Chemists (CATC)

Tipo de entidad: Academias Científicas

Ramis R.; Casasnovas R.; Ortega-Castro J.; Frau J.; Alvarez-Idaboy J.R.; Mora-Diez N.



- 11 Título del trabajo:** Nitration modifies the antioxidant properties of alpha-synuclein
Nombre del congreso: 20th International Conference on Oxidative Stress Reduction, Redox Homeostasis and Antioxidants (25-26 June)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Paris, Francia
Fecha de celebración: 2018
Fecha de finalización: 2018
Entidad organizadora: Univerité Pierre et Marie Curie **Tipo de entidad:** Universidad
Adrover M.; Martínez-Orozco H.; Uceda A.B.; Mariño L.; Vilanova B.; Ortega-Castro J.; Frau J.
- 12 Título del trabajo:** Studying the glycation effect on the α -synuclein capacity to reduce the formation of metal-catalyzed reactive oxygen species
Nombre del congreso: 'Intrinsically Disordered Proteins' Gordon Research Conference
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Les Diablerets, Suiza
Fecha de celebración: 2018
Fecha de finalización: 2018
Adrover, M.; Uceda, A.B.; Mariño, L.; Vilanova, B.; Ortega-Castro, J.; Frau, J.
- 13 Título del trabajo:** Non-Enzymatic modification of hen egg white lysozyme by glycolaldehyde proves that intermolecular crosslinks are involved in the aggregation of glycated proteins
Nombre del congreso: 16th Congress of the Spanish Biophysical Society
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Sevilla, España
Fecha de celebración: 2017
Fecha de finalización: 2017
Entidad organizadora: Sociedad de Biofísica de España **Tipo de entidad:** Asociaciones
L. Mariño; C. Maya-Aguirre; K. Pauwels; B. Vilanova; J. Ortega-Castro; J. Frau; J. Donoso; M. Adrover Frau, J.
- 14 Título del trabajo:** Dinámicas moleculares de la α -sinucleína, la proteína del Parkinson.
Nombre del congreso: IV Jornadas IdISBa
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Nacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Palma, España
Fecha de celebración: 2017
Fecha de finalización: 2017
Entidad organizadora: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad
Ramis R.; Ortega-Castro J.; Vilanova, B.; Adrover, M.; Frau J.
- 15 Título del trabajo:** Non-enzymatic modification of hen egg white lysozyme by glycolaldehyde proves that intermolecular crosslinks are involved in the aggregation of glycated proteins
Nombre del congreso: 16 th Congress Spanish Biophysical Society (6-8 June)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Sevilla, España



Fecha de celebración: 2017

Fecha de finalización: 2017

Entidad organizadora: Sociedad de Biofísica de España

Tipo de entidad: Asociaciones

Mariño L.; Maya-Aguirre C.A.; Pauwels K.; Vilanova V.; Ortega-Castro, J.; Frau, J.; Donoso J.; Adrover, M.

- 16 Título del trabajo:** Tuning the SIRAH coarse-grained force field to reproduce the experimental dimensions of the intrinsically disordered protein α -synuclein

Nombre del congreso: EUCO-TCC Workshop 11th European Conference on Theoretical and Computational Chemistry (3-7 September)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Barcelona, España

Fecha de celebración: 2017

Fecha de finalización: 2017

Entidad organizadora: Euchems

Tipo de entidad: Químicas

Ramis, R.; Ortega-Castro, J.; Vilanova, B.; Adrover, M.; Frau, J.

- 17 Título del trabajo:** Cu²⁺-alpha-synuclein complexes: a DFT study of the relative stability of different binding sites.

Nombre del congreso: 3rd International Symposium on Functional Metal Complexes that Bind to Biomolecules

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Palma, España

Fecha de celebración: 2016

Fecha de finalización: 2016

Entidad organizadora: Universidad de las Islas Baleares

Tipo de entidad: Universidad

Ramis R.; Ortega-Castro J.; Frau J.

- 18 Título del trabajo:** Interaction between alpha-synuclein and metal ions. A DFT study

Nombre del congreso: 6th EuCheMS (European Chemical Science) Chemistry Congress

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Sevilla, España

Fecha de celebración: 2016

Fecha de finalización: 2016

Juan Frau Munar; Rafael Ramis Cortés; Joaquín Ortega Castro.

- 19 Título del trabajo:** Formation of Interstrand Cross-Link in DNA by Nitrous Acid. Density Functional Theory and Molecular Dynamics Simulations.

Nombre del congreso: 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Uruguay

Fecha de celebración: 2016

Fecha de finalización: 2016

N. Hernández-Haro; J. Ortega-Castro; A. Hernández-Laguna; A. Grand.



- 20** **Título del trabajo:** Formation of interstrand cross-link (ICLs) in DNA by nitrous acid
Nombre del congreso: 15th congress of the spanish biophysical society (SBE 2015)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: España
Fecha de celebración: 2015
Fecha de finalización: 2015
Ortega-Castro, J.; Hernández-Haro, N.; Frau, J.; Muñoz, F.; Donoso, J.; Grand, A.
- 21** **Título del trabajo:** Excess elastic properties of the 2M1 Muscovite-Paragonite series vs Pressure up to 6 GPa.
Nombre del congreso: CHITEL 2015
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: Turin, Italia
Fecha de celebración: 2015
Fecha de finalización: 2015
Entidad organizadora: Università degli Studi di Torino
Hernández-Laguna, A.; Hernández-Haro, N.; Muñoz-Santiburcio, D.; Garrido, C.J.; Pérez del Valle, C.; Ortega-Castro, J.; Sainz-Díaz, C.I.
- 22** **Título del trabajo:** A DFT study of the CM-PE formation from glyoxal and Phosphatidylethanolamine surface. Comparison with the formation of CML from glyoxal and L-lysine.
Nombre del congreso: Chitel 2015. Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Torino, Italia
Fecha de celebración: 2015
Fecha de finalización: 2015
Entidad organizadora: Università degli Studi di Torino
Ortega-Castro J.; Solís-Calero, C.; Hernández-Laguna A.; Frau J.; Muñoz F.
- 23** **Título del trabajo:** Molecular Dynamics study on the human Farnesyl Pyrophosphate synthase enzyme inhibition by zoledronate and risedronate compounds
Nombre del congreso: Congress of Theoretical chemists of latin expression (CHITEL)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Torino, Italia
Fecha de celebración: 2015
Fecha de finalización: 2015
Entidad organizadora: Università degli Studi di Torino
Frau, J.; Fernández, D.; Vilanova, B.; Ortega Castro, J..
- 24** **Título del trabajo:** Theoretical study of the surface tension in (001) surface of increasing negative charged alpha-Ag₂WO₄
Nombre del congreso: CHITEL 2015
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Turin, Italia
Fecha de celebración: 2015
Fecha de finalización: 2015



Entidad organizadora: Università degli Studi di Torino

Hernández Laguna, A.; Hernández Haro, N.; Ortega Castro, J.; Andrés, J.; Gracia, L.; Longo, E.

- 25 Título del trabajo:** Hydrolysis of Si-O bonds in tetrahedral sheet models of (001) basal surface of phyllosilicates

Nombre del congreso: CHITEL 2015

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Turín, Italia

Fecha de celebración: 2015

Fecha de finalización: 2015

A. Hernández Laguna; N. Hernández Haro; D. Muñoz-Santiburcio; C.I. Sainz-Díaz; A. Grand; J. Ortega Castro; F.J. Huertas.

- 26 Título del trabajo:** New insights into human farnesyl pyrophosphate synthase inhibition by second-generation bisphosphonate drugs

Nombre del congreso: Computational Advances in Drug Discovery

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Lausanne, Suiza

Fecha de celebración: 2015

Fecha de finalización: 2015

Entidad organizadora: École Polytechnique
Fédérale de Lausanne (EPFL)

Tipo de entidad: Centros de Investigación

Fernández, D.; Ortega Castro, J.; Frau, J.

- 27 Título del trabajo:** Molecular dynamic study of human FPPS enzyme complexed with the natural substrate and NBPs

Nombre del congreso: Proteins & Nanoparticles @ Membranes

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Jülich, Alemania

Fecha de celebración: 2014

Fecha de finalización: 2014

Entidad organizadora: Forschungszentrum Jülich
GMBH (FZJ) - Jülich Research Centre

Tipo de entidad: Centros de Investigación

David Fernández; Joaquin Ortega-Castro; Juan Frau.

- 28 Título del trabajo:** DFT study of the mechanism of the reaction of aminoguanidine with methylglyoxal.

Nombre del congreso: 9th congress of electronic structure: Principles and Application. ESPA 2014

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Badajoz, España

Fecha de celebración: 2014

Fecha de finalización: 2014

C. Solís-Calero; J. Ortega-Castro; A. Hernández-Laguna; F. Muñoz.

- 29 Título del trabajo:** A DFT study of CM-PE formation from Glyoxal and PE surface.

Nombre del congreso: 9th congress of electronic structure: Principles and Application. ESPA 2014

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster



Ciudad de celebración: Badajoz, España
Fecha de celebración: 2014
Fecha de finalización: 2014
C. Solís-Calero; J. Ortega-Castro; F. Muñoz.

- 30** **Título del trabajo:** DFT bulk moduli of Muscovite-Paragonite series.
Nombre del congreso: 9th congress of electronic structure: Principles and Application. ESPA 2014
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Badajoz, España
Fecha de celebración: 2014
Fecha de finalización: 2014
N. Hernández-Haro; D. Muñoz-Santiburcio; C. Pérez del Valle; C.I. Sainz-Díaz; J. Ortega-Castro; A. Hernández-Laguna.
- 31** **Título del trabajo:** A DFT Study of the Amadori rearrangement above a Phosphatidylethanolamine surface.
Nombre del congreso: 39th International conference theoretical chemists of latin expression. Quitel 2013
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: España
Fecha de celebración: 2013
Fecha de finalización: 2013
Solis-Calero, S.; Ortega-Castro, J.; Hernández-Laguna, A.; Muñoz, F.
- 32** **Título del trabajo:** DFT calculations of stability constants (logb) and pKa values of metal complexes in solution. Application to copper(II) complexes of biological relevance
Nombre del congreso: XXXIX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 2013
Fecha de finalización: 2013
Entidad organizadora: Universidad de Granada **Tipo de entidad:** Universidad
Muñoz, F.; Casanovas, R.; Ortega-Castro, J.; Donoso, J.; Frau, J.
- 33** **Título del trabajo:** Prediction of carbon acidities due to metal chelation by pyridoxal and pyridoxamine Schiff bases with amino acids
Nombre del congreso: XXXIX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 2013
Fecha de finalización: 2013
Entidad organizadora: Universidad de Granada **Tipo de entidad:** Universidad
Frau, J.; Casanovas, R.; Estarellas, M.P.; Ortega-Castro, J.; Muñoz, F.
- 34** **Título del trabajo:** 3D-QSAR and Docking Studies on the Inhibition of Human Farnesyl Pyrophosphate Synthase (fpps) by Nitrogen Bisphosphonates
Nombre del congreso: XXXIX International Conference Theoretical Chemists of Latin Expression, Quitel 2013
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional



Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Granada, España

Fecha de celebración: 2013

Fecha de finalización: 2013

Fernández Payeras, D.; Pascual Estarellas, M.; Ortega Castro, J.; Frau Munar, J.

- 35** **Título del trabajo:** DFT study of the adsorption of water molecules on (001) muscovite surface.
Nombre del congreso: 39th International conference theoretical chemists of latin expression. Quitel 2013
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 2013
Fecha de finalización: 2013
Hernández-Haro, N.; Ortega-Castro, J.; Timon, V.; Huertas, F.J.; Sainz-Díaz, C.I.; Hernández-Laguna, A.
- 36** **Título del trabajo:** Glycation Effects on the alpha-helix Stability of Short Peptides in Aqueous Solution from Molecular Dynamics Simulations
Nombre del congreso: EMBO Workshop on Glycoproteins: From structure to disease
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 2013
Fecha de finalización: 2013
Entidad organizadora: European Molecular Biology Organization EMBO **Tipo de entidad:** Otros organismos
Casasnovas, R.; Ortega-Castro, J.; Adrover, M.; Frau, J.; Vilanova, B.; Donoso, J.; Muñoz, F.
- 37** **Título del trabajo:** Extraordinary acceleration rates of decarboxylation reactions carried out by modestly efficient enzymes
Nombre del congreso: XXXIX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 2013
Fecha de finalización: 2013
Entidad organizadora: Universidad de Granada **Tipo de entidad:** Universidad
Casasnovas, R.; Frau, J.; Caravati, S.; Ortega-Castro, J.; Donoso, J.; Muñoz, F.; Parrinello, M.
- 38** **Título del trabajo:** Glycation Effects on the alpha-helix Stability of Short Peptides in Aqueous Solution from Molecular Dynamics Simulations
Nombre del congreso: EMBO Workshop Glycoproteins: From Structure to Disease
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 2013
Fecha de finalización: 2013
Entidad organizadora: Universidad de las Islas Baleares **Tipo de entidad:** Universidad
Casasnovas, R.; Ortega-Castro, J.; Adrover, M.; Frau, J.; Vilanova, B.; Donoso, J.; Muñoz, F."Libro de abstracts".



- 39** **Título del trabajo:** Extraordinary acceleration rates of decarboxilation reactions carried out by modestly efficient enzymes
Nombre del congreso: XXXIX Congerso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 2013
Fecha de finalización: 2013
Entidad organizadora: Universidad de Granada **Tipo de entidad:** Universidad
Casasnovas, R.; Frau, J.; Caravati, S.; Ortega-Castro, J.; Donoso, J.; Muñoz, F.; Parrinello, M.
- 40** **Título del trabajo:** A DFT study on the formation mechanisms of Advanced Glycation End-products above an amio phospholipid surface model
Nombre del congreso: EMBO Workshop on Glycoproteins: From structure to disease
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 2013
Fecha de finalización: 2013
Entidad organizadora: European Molecular Biology Organization EMBO **Tipo de entidad:** Otros organismos
Solís-Calero, C.; Fernández, D.; Ortega-Castro, J.; Frau, J.; Donoso, J.; Muñoz F.
- 41** **Título del trabajo:** Pressure behaviour of the 2M1 Moscovite-Paragonite series
Nombre del congreso: XXXVIII Congrès des Chimistes Theoriciens d'Expression Latine
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Natal, Brasil
Fecha de celebración: 2012
Fecha de finalización: 2012
Hernández-Haro, N.; Muñoz-Santiburcio, D.; Pérez del Valle, C.; Ortega-Castro, J.; Sainz-Díaz, C.I.; Hernández-Laguna, A.
- 42** **Título del trabajo:** A comparative DFT study of the Schiff base formation from Acetaldehyde and Butylamine, Glycine and Phosphatidylethanolamine.
Nombre del congreso: 8th congress on electronic structure: principles and applications. ESPA 2012.
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Barcelona, España
Fecha de celebración: 2012
Fecha de finalización: 2012
C. Solis-Calero; J. Ortega-Castro; A. Hernández-Laguna; F. Muñoz.
- 43** **Título del trabajo:** C-H activation and reaction Specificity in PLP-Schiff bases
Nombre del congreso: VIIIth Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2012 192
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Barcelona, España
Fecha de celebración: 2012
Fecha de finalización: 2012



Entidad organizadora: Universitat de Barcelona **Tipo de entidad:** Universidad
Casasnovas, R.; Adrover, M.; Ortega-Castro, J.; Frau, J.; Donoso, J.; Muñoz, F. "P-CR-08".

- 44** **Título del trabajo:** Influence of the interlayer cation order/disorder on the elastic constant of 2M1 Muscovite-Paragonite series
Nombre del congreso: 8th congress on electronic structure: principles and applications. ESPA 2012.
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Barcelona, España
Fecha de celebración: 2012
Fecha de finalización: 2012
N. Hernández-Haro; D. Muñoz-Santiburcio; C. Perez del Valle; J. Ortega-Castro; C.I. Sainz-Díaz, A. Hernández-Laguna.
- 45** **Título del trabajo:** Human Farnesyl Pirophosphate Synthase (FPPS) inhibition by aminobisphosphates. A 3D-QSAR
Nombre del congreso: 15 th International Workshop on Quantitative Structure-Activity Relationships in Environmental and Health Sciences
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Tallin (Estonia), Estonia
Fecha de celebración: 2012
Fecha de finalización: 2012
Entidad organizadora: University of Tartu **Tipo de entidad:** Universidad
Fernández-Payeras, D.; Ortega-Castro, J.; Frau, J."pg 172".
- 46** **Título del trabajo:** Control enzimàtic de les reaccions de racemització vs transaminació d'aminoàcids
Nombre del congreso: VII Trobada de Joves Investigadors dels Països Catalans
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Nacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia oral (comunicación oral)
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 2012
Fecha de finalización: 2012
Entidad organizadora: Societat Catalana de Química **Tipo de entidad:** Otros organismos
Casasnovas, R.; Adrover, M.; Ortega-Castro, J.; Frau, J.; Donoso, J.; Muñoz, F.
- 47** **Título del trabajo:** Theoretical study on carbon acidities of PLP Schiff bases
Nombre del congreso: Ninth Triennial Congress of World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España
Fecha de celebración: 2011
Fecha de finalización: 2011
Casasnovas, R.; Frau, J.; Ortega-Castro, J.; Donoso, J.; Muñoz, F."PII 251".
- 48** **Título del trabajo:** Avoiding gas phase calculations in theoretical pKa predictions
Nombre del congreso: Ninth Triennial Congress of World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster



Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 2011

Fecha de finalización: 2011

Frau, J.; Casasnovas, R.; Sastre, S.; Fernández, D.; Ortega-Castro, J.; Vilanova, B.; Donoso, J.; Muñoz, F. "PII 175".

- 49 Título del trabajo:** DFT study on phospholipids mediated decomposition of hydrogen peroxide
Nombre del congreso: 9th WATOC-2011. Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 2011

Fecha de finalización: 2011

Solis-Calero, C.; Ortega-Castro, J.; Muñoz, F.

- 50 Título del trabajo:** DFT elastic properties of muscovite-paragonite series
Nombre del congreso: 9th Triennial Congress of the world association of theoretical and computational chemists

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 2011

Fecha de finalización: 2011

Hernández-Laguna, A.; Hernández-Haro, N.; Muñoz-Santiburcio, D.; Soto, J.I.; Perez del Valle, C.; Ortega-Castro, J.

- 51 Título del trabajo:** Reactivity of a Phospholipid Monolayer Model under Periodic Boundary Conditions: A Density Functional Theory Study of the Schiff Base Formation between Phosphatidyl ethanolamine and Acetaldehyde

Nombre del congreso: 3ª Reunión de química teórica para Medio Ambiente y Salud.

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

Ciudad de celebración: Puerto Escondido. Oaxaca., México

Fecha de celebración: 2011

Fecha de finalización: 2011

Entidad organizadora: UNAM

J. Ortega-Castro.

- 52 Título del trabajo:** Avoiding gas phase calculations in theoretical pKa predictions

Nombre del congreso: WATOC 2011

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

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

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 2011

Fecha de finalización: 2011

Frau, J.; Casasnovas, R.; Sastre, S.; Fernández, D.; Ortega-Castro, J.; Vilanova, B.; Muñoz, F.; Donoso, J.

- 53 Título del trabajo:** Schiff bases of vitamin B6. Formation processes and electron sink effects

Nombre del congreso: XXXVIII Reunión Bienal de la RSEQ

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional



Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote

Ciudad de celebración: Valencia, España

Fecha de celebración: 2011

Fecha de finalización: 2011

Donoso, J.; Ortega-Castro, J.; Casasnovas, R.; Frau, J.; Salvà, A.; Vilanova, B.; Muñoz, F. "PS10".

54 Título del trabajo: Theoretical study on carbon acidities of PLP Schiff bases

Nombre del congreso: Nith Triennial congress of the world association of theoretical and computational chemists. WATOC 2011

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela, España

Fecha de celebración: 2011

Fecha de finalización: 2011

R. Casasnovas; J. Frau; J. Ortega-castro; J. Donoso; F. Muñoz.

55 Título del trabajo: Assesment of aqueous isodesmic reaction and CBS quantum methods for pKa predictions.

Nombre del congreso: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2010

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Oviedo, España

Fecha de celebración: 2010

Fecha de finalización: 2010

Casasnovas R.; Fernández D.; Sastre S.; Ortega-Castro J.; Vilanova B.; Frau J.; Donoso J.; Muñoz F.

56 Título del trabajo: High-spin Fe(3+) complexes of some AGE inhibitors

Nombre del congreso: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2010

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Oviedo, España

Fecha de celebración: 2010

Fecha de finalización: 2010

Ortega-Castro, J.; Frau, J.; Casasnovas, R.; Donoso, J.; Muñoz, F.

57 Título del trabajo: DFT Studies on Schiff base formation of Vitamin B6 analogues. Reaction between a pyridoxamine analogue and carbonyl compounds.

Nombre del congreso: 7th ESPA 2010. Electronic Structure: Principles and Applications

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Oviedo, España

Fecha de celebración: 2010

Fecha de finalización: 2010

Ortega-Castro, J.; Adrover, M.; Salvà, A.; Frau, J.; Donoso, J.; Muñoz, F. "Libro de abstracts".

58 Título del trabajo: Using B-learning in chemistry and biochemistry degrees.

Nombre del congreso: EDULEARN.2010 International Conference on Education and New Learning Technologies

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Barcelona, España



Fecha de celebración: 2010

Fecha de finalización: 2010

Ortega-Castro, J.; Donoso, J.; Vilanova, B.; Frau, J.; Muñoz, F.

59 Título del trabajo: A blended learning project in general chemistry for undergraduate levels in chemistry and biochemistry degrees

Nombre del congreso: EDULEARN10. International Conference on Education and New Learning Technologies

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Barcelona, España

Fecha de celebración: 2010

Fecha de finalización: 2010

Donoso, J.; Ortega-Castro, J.; Vilanova, B.; Frau, J.; Muñoz, F. "ISBN: 978-84-613-9386-2".

60 Título del trabajo: High-spin Fe(3+) complexes of some AGE inhibitors

Nombre del congreso: 36eme Congres de Chimie Teorique d'expression latine. CHITEL 2010

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Anglet, Francia

Fecha de celebración: 2010

Fecha de finalización: 2010

Ortega-Castro, J.; Frau, J.; Casasnovas, R.; Donoso, J.; Muñoz, F.

61 Título del trabajo: High-spin complexes of some AGE inhibitors

Nombre del congreso: CHITEL-2010

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Anglet, Francia

Fecha de celebración: 2010

Fecha de finalización: 2010

Ortega-Castro, J.; Frau, J.; Casasnovas, R.; Donoso, J.; Muñoz, F.

62 Título del trabajo: UV/Vis spectra prediction in models of Vitamin B6

Nombre del congreso: Theoretical Chemistry: Modeling reactivity from gas phase to biomolecules and solids. Dedicated to Prof. Santiago Olivella on occasion of his 65th birthday

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Barcelona, España

Fecha de celebración: 2009

Fecha de finalización: 2009

Adrover, M.; Caldés, C.; Vilanova, B.; Frau, J.; Casasnovas, R.; Ortega-Castro, J.; Donoso, J.; Muñoz, F.

63 Título del trabajo: Theoretical pKa calculations of substituted pyridines

Nombre del congreso: Theoretical Chemistry: Modeling reactivity from gas phase to biomolecules and solids. Dedicated to Prof. Santiago Olivella on occasion of his 65th birthday

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Barcelona, España

Fecha de celebración: 2009

Fecha de finalización: 2009



Casasnovas, R.; Frau, J.; Ortega-Castro, J.; Salvà, A.; Donoso, J.; Muñoz, F.

- 64** **Título del trabajo:** Studt of Cu²⁺ complexes of some AGE inhibitors by DFT Methods
Nombre del congreso: Theoretical Chemistry: Modeling reactivity from gas phase to biomolecules and solids
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Barcelona, España
Fecha de celebración: 2009
Fecha de finalización: 2009
Ortega-Castro, J.; Adrover, M.; Frau, J.; Donoso, J.; Muñoz, F.
- 65** **Título del trabajo:** DFT study of the normal strains and elastic properties of Muscovite-Paragonite series
Nombre del congreso: 13th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Lyon, Francia
Fecha de celebración: 2009
Fecha de finalización: 2009
Ortega-Castro, J.; Hernández-Haro, N.; Timón, V.; Sainz-Díaz, C.I.; Hernández-Laguna, A.
- 66** **Título del trabajo:** Computational pKa calculations of mono and diprotic pyridines by quantum methods
Nombre del congreso: 13th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Lyon, Francia
Fecha de celebración: 2009
Fecha de finalización: 2009
Casasnovas, R.; Frau, J.; Ortega-Castro, J.; Salvà, A.; Donoso, J.; Muñoz, F.
- 67** **Título del trabajo:** DFT study of Cu(II) complexes of Aminoguanidine, Pyridoxamine, Amadori compound, Ascorbic acid and LR-74 like AGE inhibitors
Nombre del congreso: 13th International Conference on the Applications of Density Functional Theory in Chemistry and Physics
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Lyon, Francia
Fecha de celebración: 2009
Fecha de finalización: 2009
Ortega-Castro, J.; Adrover, M.; Frau, J.; Donoso, J.; Muñoz, F.
- 68** **Título del trabajo:** Estudio de fármacos mediante métodos computacionales.
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: H Puebla de Zaragoza, México
Fecha de celebración: 2009
Fecha de finalización: 2009
J. Ortega-Castro.



- 69** **Título del trabajo:** Reacción de Maillard y otras reacciones de interés biológico mediante técnicas computacionales.
Nombre del congreso: 1ª Reunión de química teórica para Medio Ambiente y Salud.
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Ponencia invitada/ Keynote
Ciudad de celebración: México D.F., México
Fecha de celebración: 2009
Fecha de finalización: 2009
Entidad organizadora: UNAM
J. Ortega-Castro.
- 70** **Título del trabajo:** High-spin complexes of some AGE inhibitors
Nombre del congreso: 7th Congress on Electronic Structure: principles and Applications. ESPA-2010
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Oviedo, España
Fecha de celebración: 2009
Fecha de finalización: 2009
Ortega-Castro, J.; Frau, J.; Casasnovas, R.; Donoso, J.; Muñoz, F.
- 71** **Título del trabajo:** Assessment of aqueous isodesmic reaction and CBS quantum methods for pKa predictions
Nombre del congreso: Chemical Bonding. Winter School in Theoretical Chemistry
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Helsinki, Finlandia
Fecha de celebración: 2009
Fecha de finalización: 2009
R. Casasnovas; D. Fernández; J. Frau; J. Ortega-Castro; A. Salvà; J. Donoso; F. Muñoz.
- 72** **Título del trabajo:** DFT Band-Gap study of Fe³⁺, Ga³⁺ and Ge⁴⁺ substitutions in 2:1 dioctahedral phyllosilicates.
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications.
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 2008
Fecha de finalización: 2008
Timón, V.; Hernández-Haro, N.; Ortega-Castro, J.; Sainz-Díaz, C.I.; Hernández-Laguna, A.
- 73** **Título del trabajo:** DFT study of the adsorption of films of partially ordered water on muscovite surface models.
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications.
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 2008
Fecha de finalización: 2008
Hernández-Haro, N.; Timón, V.; Ortega-Castro, J.; Sainz-Díaz, C.I.; Hernández-Laguna, A.



- 74** **Título del trabajo:** DFT study of strains and elastic properties of muscovite.
Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications.
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 2008
Fecha de finalización: 2008
Ortega-Castro, J.; Hernández-Haro, N.; Timón, V.; Sainz-Díaz, C.I.; Hernández-Laguna, A.
- 75** **Título del trabajo:** Simplification of CBS-QB3 for predictions of gas phase free energy deprotonation data
Nombre del congreso: 7th European Conference on Computational Chemistry EUCC-CC7
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Venice, Italia
Fecha de celebración: 2008
Fecha de finalización: 2008
Casasnovas, R.; Frau, J.; Ortega, J.; Donoso J.; Muñoz F.
- 76** **Título del trabajo:** DFT study of advance glycation endproducts inhibitors
Nombre del congreso: 6th ESPA 2008. Electronic Structure: Principles and Applications
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 2008
Fecha de finalización: 2008
Entidad organizadora: Universidad de las Islas **Tipo de entidad:** Universidad Baleares
Ortega-Castro, J.; Adrover, M.; Frau, J.; Donoso J.; Muñoz F. "Libro de abstracts (ISSN: 978-84-8384-058-0)".
- 77** **Nombre del congreso:** 6th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications - ESPA 2008
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Comité científico
Ciudad de celebración: España
Fecha de celebración: 2008
Fecha de finalización: 2008
Muñoz, F.; Donoso J.; Frau, J.; Vilanova, B.; Salvà A.; Adrover M.; Ortega-Castro, J.; Hernández, N.; Casasnovas, R.
- 78** **Nombre del congreso:** 6th ESPA 2008. Electronic Structure: Principles and Applications
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Comité organizador
Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España
Fecha de celebración: 2008
Fecha de finalización: 2008
Entidad organizadora: Universidad de las Islas **Tipo de entidad:** Universidad Baleares
Francisco Muñoz Izquierdo; Josefa Donoso Pardo; Juan Frau Munar; Bartolomé Vilanova Canet; Antonio Salvà Salvà; Miquel Adrover Estelrich; Joaquin Ortega Castro; Noemí Hernández Haro; Rodrigo Casasnovas Perera. "Libro de abstracts (ISSN: 978-84-8384-058-0)".



- 79** **Título del trabajo:** Theoretical high-pressure study of substituted 2:1 dioctahedral phyllosilicates.
Nombre del congreso: EuroClay 2007
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Aveiro, Portugal
Fecha de celebración: 2007
Fecha de finalización: 2007
Ortega-Castro, J.; Sainz-Díaz, C.I.; Hernández-Laguna, A.
- 80** **Título del trabajo:** DFT elastic constants of 2:1 dioctahedral phyllosilicates.
Nombre del congreso: EuroClay 2007
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Aveiro, Portugal
Fecha de celebración: 2007
Fecha de finalización: 2007
Ortega-Castro, J.; Sainz-Díaz, C.I.; Hernández-Laguna, A.
- 81** **Título del trabajo:** Estudio DFT de la influencia de la presión sobre el volumen de la pirofilita.
Nombre del congreso: XXXI Reunión de la Bienal de Física
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Nacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 2007
Fecha de finalización: 2007
Ortega-Castro, J.; Sainz-Díaz, C.I.; Hernández-Laguna, A.
- 82** **Título del trabajo:** Kinetic study of the reaction between Glycoaldehyde and N-acetyl-Cys, and N-acetyl-Phe-Lys
Nombre del congreso: 9th International Symposium on the Maillard Reaction
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Munich, Alemania
Fecha de celebración: 2007
Fecha de finalización: 2007
Adrover, M.; Villanova, B.; Frau, J.; Ortega, F.; Muñoz, F.; Donoso, J.
- 83** **Título del trabajo:** Pyridoxamine reacts with the carbonyl group of Amadori compounds.
Nombre del congreso: 9th International Symposium on the Maillard Reaction.
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional
Tipo de participación: Participativo - Póster
Ciudad de celebración: Munich, Alemania
Fecha de celebración: 2007
Fecha de finalización: 2007
Adrover, M.; Vilanova, B.; Frau, J.; Ortega, J.; Salva, A.; Muñoz, F.; Donoso, J.
- 84** **Título del trabajo:** Estudio teórico de la distribución catiónica Al/Mg y Al/Fe en la capa octaédrica de Filosilicatos 2:1 dioctaédricos.
Nombre del congreso: 4º Encuentro Franco-Español de Química y Física del Estado Sólido.
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Nacional
Tipo de participación: Participativo - Póster



Ciudad de celebración: Bilbao, España

Fecha de celebración: 2006

Fecha de finalización: 2006

Ortega-Castro, J.; Hernández-Haro, N.; Sainz-Díaz, C.I.; Dove, M.T.; Hernández-Laguna, A.

85 Título del trabajo: Distribuciones catiónicas binarias en la capa octaédrica de filosilicatos 2:1 dioctaédricos por métodos mecano-cuánticos.

Nombre del congreso: 26º Reunión de la Sociedad Española de Mineralogía y 20º Reunión de la Sociedad Española de Arcillas.

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Nacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Oviedo., España

Fecha de celebración: 2006

Fecha de finalización: 2006

Ortega-Castro, J.; Sainz-Díaz, C.I.; Dove, M.T.; Hernández-Laguna, A.

86 Título del trabajo: Estudio de los Pseudopotenciales aplicados para el cálculo de filosilicatos dioctaédricos 2:1.

Nombre del congreso: 18º Reunión de la Sociedad Española de Arcillas.

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Nacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Madrid, España

Fecha de celebración: 2005

Fecha de finalización: 2005

J. Ortega Castro; C.I. Sainz Díaz; A. Hernández Laguna.

87 Título del trabajo: DFT study of advanced glycation endproducts inhibitors.

Nombre del congreso: Electronic Structure: Principles and Applications.

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Palma de Mallorca, España

Fecha de celebración: 2005

Fecha de finalización: 2005

Ortega, J.; Adrover, M.; Frau, J.; Donoso J.; Muñoz F.

88 Título del trabajo: El método del hueco de Coulomb Blando aplicado a la determinación de estructura molecular

Nombre del congreso: 29ème Congrès International des Chémistes Théoriciens d'Expression Latine (Quitel XXIX)

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional

Tipo de participación: Participativo - Póster

Ciudad de celebración: Marruecos

Fecha de celebración: 2003

Fecha de finalización: 2003

J. Ortega-Castro; P. Otto; A. Hernández-Laguna.



Trabajos presentados en jornadas, seminarios, talleres de trabajo y/o cursos nacionales o internacionales

- 1** **Título del trabajo:** Reactivity of a Phospholipid Monolayer Model under Periodic Boundary Conditions: A Density Functional Theory Study of the Schiff Base Formation between Phosphatidyl ethanolamine and Acetaldehyde
Nombre del evento: 3ª Reunión de la Red de Química Teórica para Medio Ambiente y Salud.
Intervención por: Ponente
Ciudad de celebración: Puerto Escondido.Oaxaca., México
Fecha de celebración: 10/01/2011
Fecha de finalización: 10/01/2011
- 2** **Título del trabajo:** Estudios de fármacos por métodos computacionales
Intervención por: Ponente
Ciudad de celebración: H. Puebla de Zaragoza, México
Fecha de celebración: 15/12/2009
Fecha de finalización: 15/12/2009
- 3** **Título del trabajo:** Reacción de Maillard y otras reacciones de interés biológico mediante técnicas computacionales.
Nombre del evento: 1ª Reunión de química teórica para Medio Ambiente y Salud.
Intervención por: Ponente
Ciudad de celebración: Mexico D.F., México
Fecha de celebración: 15/12/2009
Fecha de finalización: 15/12/2009

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

Organización de actividades de I+D+i

- 1** **Título de la actividad:** EMBO Workshop Glycoproteins: From Structure to Disease
Tipo de actividad: Organizador de congreso
Fecha de inicio: 2013
- 2** **Título de la actividad:** 6th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. ESPA 2008.
Tipo de actividad: Organizador
Fecha de inicio: 2008

Gestión de I+D+i

Nombre de la actividad: Desarrollo de la plataforma para la investigación bioinformática de IC
Fecha de inicio: 2009



Otros méritos

Estancias en centros de I+D+i públicos o privados

- 1** **Entidad de realización:** Universidad de Cambridge
Ciudad entidad realización: CAMBRIDGE, Reino Unido
Fecha de inicio: 2005 **Duración:** 3 meses
Objetivos de la estancia: Predoctoral
Tareas contrastables: Estudio de las propiedades mecánicas en filosilicatos 2:1 dioctaédricos.
- 2** **Entidad de realización:** Universidad de Cambridge
Ciudad entidad realización: CAMBRIDGE, Reino Unido
Fecha de inicio: 2004 **Duración:** 2 meses
Objetivos de la estancia: Predoctoral
Tareas contrastables: Efectos de la sustitución isomórfica de cationes.
- 3** **Entidad de realización:** Consejo Superior de Investigaciones Científicas -Estación Experimental del Zaidín.
Ciudad entidad realización: España
Fecha de inicio: 2004 **Duración:** 3 años - 6 meses
Objetivos de la estancia: Predoctoral
Tareas contrastables: Estudio del ordenamiento catiónico y propiedades elásticas en minerales.
- 4** **Entidad de realización:** Universidad de Friedrich-Alexander Erlangen-Nürnberg
Ciudad entidad realización: Erlangen, Alemania
Fecha de inicio: 2002 **Duración:** 12 meses
Objetivos de la estancia: Contratado/a
Tareas contrastables: Método del Huevo de Coulomb Blando aplicado a moléculas.

Ayudas y becas obtenidas

Nombre de la ayuda: Becario FPI en el proyecto 'Efectos de la sustitución isomórfica de cationes y su distribución sobre las propiedades cristalográficas y las reacciones de deshidroxilación en silicatos laminares'(BTE2002-03838)
Fecha de concesión: 01/05/2003 **Duración:** 3 años - 5 meses - 1 día
Fecha de finalización: 01/10/2006

Resumen de otros méritos

- 1** **Descripción del mérito:** Otros cursos: Tecnología, aprendizaje y educación.
Entidad acreditante: Universidad de las islas baleares
Fecha de concesión: 17/11/2009
- 2** **Descripción del mérito:** Otros cursos: Orientación sobre docencia en el marco de las EEES (Sesión 1).
Entidad acreditante: Universidad de las islas baleares
Fecha de concesión: 31/03/2009



- 3 Descripción del mérito:** Otros cursos: 7º Escuela de Química Teórica de la UIB; profesor; C. im= 4; Universidad de las Islas Baleares.
Fecha de concesión: 2009
- 4 Descripción del mérito:** Líneas de investigación: Estudio de los mecanismos de inhibición de la formación de los ALE.; 01/12/2008 -- 01/12/2010
Entidad acreditante: Universidad de las Islas Baleares.
Fecha de concesión: 01/12/2008
- 5 Descripción del mérito:** Otros cursos: CURSO DE EXPERTO UNIVERSITARIO EN TECNICAS DOCENTES DE GRADO SUPERIOR (2ª EDICION) (100h)
Entidad acreditante: Universidad de las islas baleares
Fecha de concesión: 01/10/2007
- 6 Descripción del mérito:** Líneas de investigación: Estudio de los mecanismos de inhibición de la formación de los AGE.; 01/01/2007 -- 01/01/2008
Entidad acreditante: Universidad de las Islas Baleares.
Fecha de concesión: 01/01/2007
- 7 Descripción del mérito:** Otros cursos: 6º Escuela de Química Teórica de la UIB; profesor; C. im= 4; Universidad de las Islas Baleares.
Fecha de concesión: 2007
- 8 Descripción del mérito:** Otros cursos: Curso de Riesgos en el laboratorio del plan de formación para el personal de la UIB. (Curso realizado.)
Fecha de concesión: 2006
- 9 Descripción del mérito:** Asistencia a Reuniones Científicas (sin Presentación ni publicación): Curso Determinación de Estructura Cristalina por Difracción y Métodos Computacionales. CSIC
Fecha de concesión: 2005
- 10 Descripción del mérito:** Asistencia a Reuniones Científicas (sin Presentación ni publicación): Workshop on ab initio phonon calculations. Cracovia.
Fecha de concesión: 02/12/2004
- 11 Descripción del mérito:** Asistencia a Reuniones Científicas (sin Presentación ni publicación): Workshop A practical introduction to Environmental eScience.
Fecha de concesión: 01/05/2004
- 12 Descripción del mérito:** Asistencia a Reuniones Científicas (sin Presentación ni publicación): Workshop Access grid on the desktop. Universidad de Cambridge.
Fecha de concesión: 01/04/2004
- 13 Descripción del mérito:** Otros cursos: Curso Determinación de Estructura Cristalina por Difracción y Métodos Computacionales. CSIC. (2004). (Curso realizado.)
Fecha de concesión: 08/03/2004
- 14 Descripción del mérito:** Asistencia a Reuniones Científicas (sin Presentación ni publicación): Curso Determinación de Estructura Cristalina por Difracción y Métodos Computacionales. CSIC
Fecha de concesión: 2004



- 15 Descripción del mérito:** Líneas de investigación: Efectos de la sustitución isomórfica de cationes y su distribución sobre las propiedades cristalográficas y las reacciones de deshidroxilación en silicatos laminares; 01/05/2003 -- 01/10/2006
Entidad acreditante: Estación Experimental del Zaidín. Consejo Superior de Investigaciones Científicas.
Fecha de concesión: 01/05/2003
- 16 Descripción del mérito:** Líneas de investigación: Investigación teórica de la influencia de la sustitución isomórfica de cationes sobre los mecanismos de las reacciones de deshidroxilación de silicatos laminares.; 01/05/2003 -- 01/10/2006
Entidad acreditante: Estación Experimental del Zaidín. Consejo Superior de Investigaciones Científicas.
Fecha de concesión: 01/05/2003
- 17 Descripción del mérito:** Asistencia a Reuniones Científicas (sin Presentación ni publicación): Cuarta escuela de Química Teórica de la UIB.
Fecha de concesión: 2003
- 18 Descripción del mérito:** Otros cursos: Cuarta escuela de Química Teórica de la UIB. Curso realizado.
Fecha de concesión: 2003
- 19 Descripción del mérito:** Otros cursos: Curso Determinación de Estructura Cristalina por Difracción y Métodos Computacionales. CSIC. (2003). (Curso realizado.)
Fecha de concesión: 2003
- 20 Descripción del mérito:** Líneas de investigación: Método del Hueco de Coulomb Blando aplicado a moléculas.; 04/02/2002 -- 17/01/2003
Entidad acreditante: Universidad Friedrich-Alexander Erlangen-Nürnberg, departamento de Química Teórica
Fecha de concesión: 04/02/2002
- 21 Descripción del mérito:** Grandes Equipos que utiliza o ha utilizado: Cluster de Supercomputación de la Estación Experimental del Zaidín.; Responsable ; 01/05/2003 -- 01/10/2006
- 22 Descripción del mérito:** Técnicas o especialidades que domina: Especialista en software científico basado en métodos ab initio.
- 23 Descripción del mérito:** Organizador del 6th congress of electronic Structure: Principles and Applications. ESPA2008. Año: 2008. Carácter Internacional.
- 24 Descripción del mérito:** ACREDITACION PARA PROFESOR TITULAR DE UNIVERSIDAD. 31/Enero/2013.
- 25 Descripción del mérito:** CONSECUCIÓN DEL COMPLEMENTO RETRIBUTIVO PARA EL ESTIMULO Y RECONOCIMIENTO DE LA ACTIVIDAD INVESTIGADORA OTORGADO POR LA AGENCIA DE CALIDAD DE LAS ISLAS BALEARES AQUIB. (1-1-2012)
- 26 Descripción del mérito:** ACREDITACIÓN DE LA ACTIVIDAD DOCENTE E INVESTIGADORA EN LA FIGURA DE PROFESOR AYUDANTE DOCTOR. referencia PAD-005-2008. (25-11-2008)



- 27 Descripción del mérito:** Convenio de Investigación entre la UIB y laboratorios SANIFIT SL. Con el Título 'Desarrollo de la plataforma para la investigación bioinformática de IC' realizado en el 2009, y como responsable del proyecto.
- 28 Descripción del mérito:** CONSECUCIÓN DEL COMPLEMENTO RETRIBUTIVO PARA EL ESTIMULO Y RECONOCIMIENTO DE LA DOCENCIA Y FORMACIÓN PERMANENTE OTORGADO POR LA AGENCIA DE CALIDAD DE LAS ISLAS BALEARES AQUIB. (1-1-2012)