



Raquel Castillo Solsona

Generado desde: Universitat Jaume I de Castelló

Fecha del documento: 25/09/2023

v 1.3.0

dad2535e8adde186bf9372aea8c89afd

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/>



Raquel Castillo Solsona

Apellidos: **Castillo Solsona**
Nombre: **Raquel**
DNI: **18979172D**
Fecha de nacimiento: **11/03/1971**
Sexo: **Mujer**
Nacionalidad: **España**
País de nacimiento: **España**
Provincia de contacto: **Castellón**
Ciudad de nacimiento: **Castelló de la Plana**
Dirección de contacto: **Avinguda Casalduch 112 3 A**
Código postal: **12005**
País de contacto: **Desconocido**
Ciudad de contacto: **Castelló de la Plana**
Teléfono fijo: **964246544**
Correo electrónico: **rcastill@uji.es**

Situación profesional actual

Entidad empleadora: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Categoría profesional: Director/a de departament **Gestión docente (Sí/No):** Si
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Fecha de inicio: 21/12/2022
Modalidad de contrato: Funcionario/a

Entidad empleadora: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Categoría profesional: Coordinador/a de doctorat interuniversitari **Gestión docente (Sí/No):** Si
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Fecha de inicio: 22/09/2021
Modalidad de contrato: Funcionario/a

Entidad empleadora: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Categoría profesional: Professor/a Titular d'Universitat **Gestión docente (Sí/No):** No
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Fecha de inicio: 01/05/2011
Modalidad de contrato: Funcionario/a **Régimen de dedicación:** Tiempo completo

Cargos y actividades desempeñados con anterioridad

	Entidad empleadora	Categoría profesional	Fecha de inicio
1	Universitat Jaume I	Secretari/ària de departament	21/12/2018
2	Universitat Jaume I	Coordinador/a d'Accions per al Desplegament del Pla Estratègic	01/01/2017
3	Universitat Jaume I	Secretari/ària de departament	19/12/2014
4	Universitat Jaume I	Especialista LOGSE	01/10/2014
5	Universitat Jaume I	Coordinador/a d'Accions per al Desplegament del Pla Estratègic	01/01/2016
6	Universitat Jaume I	Coordinador/a d'Accions per al Desplegament del Pla Estratègic	01/03/2014
7	Universitat Jaume I	Especialista LOGSE	01/10/2011
8	Universitat Jaume I	director/a del projecte pla estratègic tipus I	01/07/2014
9	Universitat Jaume I	Coordinador/a d'Accions per al Desplegament del Pla Estratègic	01/01/2012
10	Universitat Jaume I	director/a del projecte pla estratègic tipus I	24/04/2013
11	Universitat Jaume I	director/a del projecte pla estratègic tipus I	01/05/2012
12	Universitat Jaume I	director/a del projecte pla estratègic tipus I	01/02/2011
13	Universitat Jaume I	Personal investigador contractat doctor	01/01/2007
14	Universitat Jaume I	Personal investigador contractat doctor	01/03/2006
15	Universitat Jaume I	Personal investigador contractat	11/05/2005
16	Universitat Jaume I	Ajudant	11/02/2002

- Entidad empleadora:** Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Categoría profesional: Secretari/ària de departament **Gestión docente (Sí/No):** Si
Fecha de inicio-fin: 21/12/2018 - 21/12/2022 **Duración:** 48 meses
- Entidad empleadora:** Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Categoría profesional: Coordinador/a d'Accions per al Desplegament del Pla Estratègic **Gestión docente (Sí/No):** Si
Fecha de inicio-fin: 01/01/2017 - 31/12/2018 **Duración:** 24 meses
- Entidad empleadora:** Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Categoría profesional: Secretari/ària de departament **Gestión docente (Sí/No):** Si
Fecha de inicio-fin: 19/12/2014 - 21/12/2018 **Duración:** 48 meses
- Entidad empleadora:** Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Categoría profesional: Especialista LOGSE **Gestión docente (Sí/No):** Si
Fecha de inicio-fin: 01/10/2014 - 30/09/2018 **Duración:** 48 meses

- 5** Entidad empleadora: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Categoría profesional: Coordinador/a d'Accions **Gestión docente (Sí/No):** Si
per al Desplegament del Pla Estratègic
Fecha de inicio-fin: 01/01/2016 - 31/12/2016 **Duración:** 12 meses
- 6** Entidad empleadora: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Categoría profesional: Coordinador/a d'Accions **Gestión docente (Sí/No):** Si
per al Desplegament del Pla Estratègic
Fecha de inicio-fin: 01/03/2014 - 31/12/2015 **Duración:** 22 meses
- 7** Entidad empleadora: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Categoría profesional: Especialista LOGSE **Gestión docente (Sí/No):** Si
Fecha de inicio-fin: 01/10/2011 - 30/09/2014 **Duración:** 36 meses
- 8** Entidad empleadora: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Categoría profesional: director/a del proyecto pla **Gestión docente (Sí/No):** Si
estratègic tipus I
Fecha de inicio-fin: 01/07/2014 - 31/07/2014 **Duración:** 1 mes
- 9** Entidad empleadora: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Categoría profesional: Coordinador/a d'Accions **Gestión docente (Sí/No):** Si
per al Desplegament del Pla Estratègic
Fecha de inicio-fin: 01/01/2012 - 31/12/2013 **Duración:** 24 meses
- 10** Entidad empleadora: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Categoría profesional: director/a del proyecto pla **Gestión docente (Sí/No):** Si
estratègic tipus I
Fecha de inicio-fin: 24/04/2013 - 30/06/2013 **Duración:** 2 meses
- 11** Entidad empleadora: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Categoría profesional: director/a del proyecto pla **Gestión docente (Sí/No):** Si
estratègic tipus I
Fecha de inicio-fin: 01/05/2012 - 31/07/2012 **Duración:** 3 meses
- 12** Entidad empleadora: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Gestión docente (Sí/No): Si



Categoría profesional: director/a del projecte pla
estratègic tipus I

Fecha de inicio-fin: 01/02/2011 - 30/04/2011

Duración: 2 meses

- 13** **Entidad empleadora:** Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Categoría profesional: Personal investigador **Gestión docente (Sí/No):** No
contractat doctor
Fecha de inicio-fin: 01/01/2007 - 30/04/2011 **Duración:** 52 meses
Régimen de dedicación: Tiempo completo
- 14** **Entidad empleadora:** Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Ciències Experimentals
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Categoría profesional: Personal investigador **Gestión docente (Sí/No):** No
contractat doctor
Fecha de inicio-fin: 01/03/2006 - 31/12/2006 **Duración:** 10 meses
Régimen de dedicación: Tiempo completo
- 15** **Entidad empleadora:** Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Ciències Experimentals
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Categoría profesional: Personal investigador **Gestión docente (Sí/No):** No
contractat
Fecha de inicio-fin: 11/05/2005 - 28/02/2006 **Duración:** 9 meses
Régimen de dedicación: Tiempo completo
- 16** **Entidad empleadora:** Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Ciències Experimentals
Ciudad entidad empleadora: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Categoría profesional: Ajudant **Gestión docente (Sí/No):** No
Fecha de inicio-fin: 11/02/2002 - 10/05/2005 **Duración:** 39 meses
Régimen de dedicación: Tiempo completo



Formación académica recibida

Titulación universitaria

Doctorados

Programa de doctorado: Química Fundamental i Aplicada

Entidad de titulación: Universitat Jaume I

Tipo de entidad: Universidad

Ciudad entidad titulación: Castellón, Comunidad Valenciana, España

Fecha de titulación: 22/01/1999

Entidad de titulación DEA: Universitat Jaume I

Doctorado Europeo: No

Título de la tesis: ESTUDIO DE LOS EFECTOS DEL MEDIO EN REACTIVIDAD QUÍMICA Y CATÁLISIS ENZIMÁTICA.

Director/a de tesis: Vicente Moliner Ibáñez

Calificación obtenida: Excel·lent Cum Laude

Mención de calidad: No

Premio extraordinario doctor: Si

Actividad docente

Formación académica impartida

1 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Trabajo de Final de Grado

Titulación universitaria: Grado en Química

Frecuencia de la actividad: 5

Fecha de finalización: 31/07/2024

Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos

Nº de horas/créditos ECTS: 2,12

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Tipo de entidad: Universidad

Departamento: Dep. de Química Física i Analítica

Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España

Idioma de la asignatura: Español

2 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Cinética Médica

Titulación universitaria: Máster Universitario en Química Aplicada y Farmacológica

Frecuencia de la actividad: 11

Fecha de finalización: 31/07/2024

Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos

Nº de horas/créditos ECTS: 7,65

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Tipo de entidad: Universidad

Departamento: Dep. de Química Física i Analítica

Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España

Idioma de la asignatura: Español

**3 Tipo de docencia:** Docencia oficial**Nombre de la asignatura/curso:** Fronteras en Química**Titulación universitaria:** Máster Universitario en Química Aplicada y Farmacológica**Frecuencia de la actividad:** 10**Fecha de finalización:** 31/07/2024**Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos**Nº de horas/créditos ECTS:** 3,7**Entidad de realización:** Universitat Jaume I**Tipo de entidad:** Universidad**Departamento:** Dep. de Química Física i Analítica**Ciudad entidad realización:** Castellón, Comunidad Valenciana, España**Idioma de la asignatura:** Español**4 Tipo de docencia:** Docencia oficial**Nombre de la asignatura/curso:** Trabajo de Final de Máster**Titulación universitaria:** Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional (Plan de 2021)**Frecuencia de la actividad:** 1**Fecha de finalización:** 31/07/2024**Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos**Nº de horas/créditos ECTS:** 0,07**Entidad de realización:** Universitat Jaume I**Tipo de entidad:** Universidad**Departamento:** Dep. de Química Física i Analítica**Ciudad entidad realización:** Castellón, Comunidad Valenciana, España**Idioma de la asignatura:** Español**5 Tipo de docencia:** Docencia oficial**Nombre de la asignatura/curso:** Química Física II**Titulación universitaria:** Grado en Química**Frecuencia de la actividad:** 5**Fecha de finalización:** 03/05/2024**Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos**Nº de horas/créditos ECTS:** 8,6**Entidad de realización:** Universitat Jaume I**Tipo de entidad:** Universidad**Departamento:** Dep. de Química Física i Analítica**Ciudad entidad realización:** Castellón, Comunidad Valenciana, España**Idioma de la asignatura:** Español**6 Tipo de docencia:** Docencia oficial**Nombre de la asignatura/curso:** Bioquímica**Titulación universitaria:** Grado en Química**Frecuencia de la actividad:** 10**Fecha de finalización:** 20/12/2023**Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos**Nº de horas/créditos ECTS:** 29,75**Entidad de realización:** Universitat Jaume I**Tipo de entidad:** Universidad**Departamento:** Dep. de Química Física i Analítica**Ciudad entidad realización:** Castellón, Comunidad Valenciana, España**Idioma de la asignatura:** Catalán**7 Tipo de docencia:** Docencia oficial**Nombre de la asignatura/curso:** Bioquímica**Titulación universitaria:** Grado en Química**Frecuencia de la actividad:** 13**Fecha de finalización:** 20/12/2023**Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos**Nº de horas/créditos ECTS:** 111,75



Entidad de realización: Universitat Jaume I
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Idioma de la asignatura: Español

Tipo de entidad: Universidad

8 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Relación Cuantitativa Estructura-Actividad
Titulación universitaria: Máster Universitario en Química Aplicada y Farmacológica
Frecuencia de la actividad: 5

Fecha de finalización: 31/07/2023

Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos

Nº de horas/créditos ECTS: 6,5

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Tipo de entidad: Universidad

Departamento: Dep. de Química Física i Analítica

Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España

Idioma de la asignatura: Español

9 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Química Física II
Titulación universitaria: Grado en Química
Frecuencia de la actividad: 2

Fecha de finalización: 21/04/2023

Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos

Nº de horas/créditos ECTS: 0,8

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Tipo de entidad: Universidad

Departamento: Dep. de Química Física i Analítica

Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España

Idioma de la asignatura: Inglés

10 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Química Física II
Titulación universitaria: Grado en Química
Frecuencia de la actividad: 2

Fecha de finalización: 21/04/2023

Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos

Nº de horas/créditos ECTS: 2,6

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Tipo de entidad: Universidad

Departamento: Dep. de Química Física i Analítica

Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España

Idioma de la asignatura: Catalán

11 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Bioquímica
Titulación universitaria: Grado en Química
Frecuencia de la actividad: 1

Fecha de finalización: 16/12/2022

Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos

Nº de horas/créditos ECTS: 2,3

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Tipo de entidad: Universidad

Departamento: Dep. de Química Física i Analítica

Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España

Idioma de la asignatura: Inglés



- 12** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Trabajo de Final de Grado
Titulación universitaria: Grado en Química
Frecuencia de la actividad: 7
Fecha de finalización: 31/07/2022 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 2,79
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Idioma de la asignatura: Inglés
- 13** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Fronteras en Química
Titulación universitaria: Máster Universitario en Química Aplicada y Farmacológica
Frecuencia de la actividad: 3
Fecha de finalización: 31/07/2021 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 0,6
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
- 14** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Trabajo de Final de Máster
Titulación universitaria: Máster Universitario en Química Teórica y Modelización Computacional (Plan de 2014)
Frecuencia de la actividad: 2
Fecha de finalización: 31/07/2020 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 0,12
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Idioma de la asignatura: Inglés
- 15** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Relación Cuantitativa Estructura-Actividad
Titulación universitaria: Máster Universitario en Química Aplicada y Farmacológica
Frecuencia de la actividad: 2
Fecha de finalización: 31/07/2018 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 1,9
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
- 16** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Trabajo de Final de Máster
Titulación universitaria: Máster Universitario en Química Aplicada y Farmacológica
Frecuencia de la actividad: 1
Fecha de finalización: 31/07/2018 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 0,1
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España



17 Tipo de docencia: Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química Física IV
Titulación universitaria: Grado en Química
Frecuencia de la actividad: 1
Fecha de finalización: 22/05/2018 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 4,02
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Idioma de la asignatura: Catalán

18 Tipo de docencia: Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química Física IV
Titulación universitaria: Grado en Química
Frecuencia de la actividad: 4
Fecha de finalización: 23/05/2017 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 6,44
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Idioma de la asignatura: Inglés

19 Tipo de docencia: Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Química Física IV
Titulación universitaria: Grado en Química
Frecuencia de la actividad: 6
Fecha de finalización: 23/05/2017 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 28,46
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Idioma de la asignatura: Español

20 Tipo de docencia: Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Fronteras en Química
Titulación universitaria: Máster Universitario en Química Aplicada y Farmacológica
Frecuencia de la actividad: 1
Fecha de finalización: 31/07/2015 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 0,2
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Idioma de la asignatura: Catalán

21 Tipo de docencia: Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Prácticas Externas
Titulación universitaria: Máster Universitario en Química Aplicada y Farmacológica
Frecuencia de la actividad: 1
Fecha de finalización: 31/07/2015 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 0,1



Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Idioma de la asignatura: Catalán

22 Tipo de docencia: Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Trabajo de Final de Máster
Titulación universitaria: Máster Universitario en Química Aplicada y Farmacológica
Frecuencia de la actividad: 1
Fecha de finalización: 31/07/2015 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 0,45
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Idioma de la asignatura: Catalán

23 Tipo de docencia: Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Prácticum
Titulación universitaria: Licenciatura en Química (Plan de 2002)
Frecuencia de la actividad: 6
Fecha de finalización: 31/07/2013 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 6,8
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Idioma de la asignatura: Español

24 Tipo de docencia: Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Cinética Médica
Titulación universitaria: Máster Universitario en Química Aplicada y Farmacológica
Frecuencia de la actividad: 1
Fecha de finalización: 31/07/2013 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 0,45
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Idioma de la asignatura: Catalán

25 Tipo de docencia: Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: La Química en la Enseñanza
Titulación universitaria: Licenciatura en Química (Plan de 2002)
Frecuencia de la actividad: 5
Fecha de finalización: 16/05/2013 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 13,5
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Idioma de la asignatura: Español



- 26** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Energía de los Procesos Químicos
Titulación universitaria: Máster Universitario en Química Aplicada y Farmacológica
Frecuencia de la actividad: 2
Fecha de finalización: 31/07/2012 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 2,8
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Idioma de la asignatura: Español
- 27** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Prácticas Externas
Titulación universitaria: Máster Universitario en Química Aplicada y Farmacológica
Frecuencia de la actividad: 1
Fecha de finalización: 31/07/2012 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 1
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Idioma de la asignatura: Español
- 28** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Trabajo de Final de Máster
Titulación universitaria: Máster Universitario en Química Aplicada y Farmacológica
Frecuencia de la actividad: 1
Fecha de finalización: 31/07/2012 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 0,5
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Idioma de la asignatura: Español
- 29** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Trabajo de Final de Máster
Titulación universitaria: Máster Universitario en Química Aplicada y Farmacológica
Frecuencia de la actividad: 1
Fecha de finalización: 31/07/2012 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 0,5
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad
Departamento: Dep. de Química Física i Analítica
Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España
Idioma de la asignatura: Español
- 30** **Tipo de docencia:** Docencia oficial
Nombre de la asignatura/curso: Laboratorio Avanzado en Química II
Titulación universitaria: Licenciatura en Química (Plan de 2002)
Frecuencia de la actividad: 1
Fecha de finalización: 17/05/2012 **Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos
Nº de horas/créditos ECTS: 4
Entidad de realización: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** Universidad



Departamento: Dep. de Química Física i Analítica

Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España

Idioma de la asignatura: Catalán

31 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Experimentación en Química I

Titulación universitaria: Ingeniería Química

Frecuencia de la actividad: 4

Fecha de finalización: 01/06/2010

Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos

Nº de horas/créditos ECTS: 9,2

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Tipo de entidad: Universidad

Departamento: Dep. de Química Física i Analítica

Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España

Idioma de la asignatura: Español

32 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Química Física I

Titulación universitaria: Ingeniería Química

Frecuencia de la actividad: 3

Fecha de finalización: 16/01/2009

Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos

Nº de horas/créditos ECTS: 9

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Tipo de entidad: Universidad

Departamento: Dep. de Química Física i Analítica

Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España

Idioma de la asignatura: Español

33 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Laboratorio Químico I

Titulación universitaria: Licenciatura en Química (Plan de 2002)

Frecuencia de la actividad: 1

Fecha de finalización: 15/01/2009

Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos

Nº de horas/créditos ECTS: 4,5

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Tipo de entidad: Universidad

Departamento: Dep. de Química Física i Analítica

Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España

Idioma de la asignatura: Español

34 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Laboratorio Químico IV

Titulación universitaria: Licenciatura en Química (Plan de 2002)

Frecuencia de la actividad: 2

Fecha de finalización: 28/05/2008

Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos

Nº de horas/créditos ECTS: 9

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Tipo de entidad: Universidad

Departamento: Dep. de Química Física i Analítica

Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España

Idioma de la asignatura: Español

35 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Química Física

Titulación universitaria: Licenciatura en Química (Plan de 2002)



Frecuencia de la actividad: 2

Fecha de finalización: 31/05/2007

Nº de horas/créditos ECTS: 5

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Departamento: Dep. de Química Física i Analítica

Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España

Idioma de la asignatura: Español

Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos

Tipo de entidad: Universidad

36 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Laboratorio Avanzado en Química III

Titulación universitaria: Licenciatura en Química (Plan de 2002)

Frecuencia de la actividad: 1

Fecha de finalización: 18/01/2007

Nº de horas/créditos ECTS: 3

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Departamento: Dep. de Química Física i Analítica

Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España

Idioma de la asignatura: Español

Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos

Tipo de entidad: Universidad

37 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Química I

Titulación universitaria: Licenciatura en Química (Plan de 2002)

Frecuencia de la actividad: 1

Fecha de finalización: 16/01/2004

Nº de horas/créditos ECTS: 3

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Departamento: Dep. de Química Física i Analítica

Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España

Idioma de la asignatura: Español

Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos

Tipo de entidad: Universidad

38 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Química Computacional II

Titulación universitaria: Licenciatura en Química

Frecuencia de la actividad: 1

Fecha de finalización: 13/06/2002

Nº de horas/créditos ECTS: 2

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Departamento: Dep. de Química Física i Analítica

Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España

Idioma de la asignatura: Español

Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos

Tipo de entidad: Universidad

39 Tipo de docencia: Docencia oficial

Nombre de la asignatura/curso: Química Física II

Titulación universitaria: Ingeniería Química

Frecuencia de la actividad: 1

Fecha de finalización: 12/06/2002

Nº de horas/créditos ECTS: 1,5

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Departamento: Dep. de Química Física i Analítica

Ciudad entidad realización: Castellón, Comunidad Valenciana, España

Idioma de la asignatura: Español

Tipo de horas/créditos ECTS: Créditos

Tipo de entidad: Universidad

**40 Tipo de docencia:** Docencia oficial**Nombre de la asignatura/curso:** Experimentación Química II**Titulación universitaria:** Licenciatura en Química**Frecuencia de la actividad:** 2**Fecha de finalización:** 31/05/2002**Tipo de horas/créditos ECTS:** Créditos**Nº de horas/créditos ECTS:** 2,5**Entidad de realización:** Universitat Jaume I**Tipo de entidad:** Universidad**Departamento:** Dep. de Química Física i Analítica**Ciudad entidad realización:** Castellón, Comunidad Valenciana, España**Idioma de la asignatura:** Español**Dirección de tesis doctorales y/o proyectos fin de carrera****1 Título del trabajo:** Theoretical Studies of the Catalytic Mechanism of the Dihydroxyacetone Kinase**Tipo de proyecto:** Tesis Doctoral**Codirector/a tesis:** Vicente Moliner Ibáñez**Entidad de realización:** Universitat Jaume I**Tipo de entidad:** Universidad**Ciudad entidad realización:** Castellón, Comunidad Valenciana, España**Alumno/a:** Isabel Bordes Pastor**Calificación obtenida:** Excel·lent Cum Laude**Fecha de defensa:** 27/09/2017**Doctorado Europeo:** No**2 Título del trabajo:** A theoretical study on the mechanism of the oxidation of substrates by human aromatase enzyme (CYP19A1)**Tipo de proyecto:** Tesis Doctoral**Codirector/a tesis:** Sergio Martí Forés**Entidad de realización:** Universitat Jaume I**Tipo de entidad:** Universidad**Ciudad entidad realización:** Castellón, Comunidad Valenciana, España**Alumno/a:** Ignacio Viciano Gonzalo**Calificación obtenida:** Excel·lent Cum Laude**Fecha de defensa:** 22/07/2016**Doctorado Europeo:** No

Experiencia científica y tecnológica

Grupos/equipos de investigación, desarrollo o innovación

- Nombre del grupo:** Bioquímica Computacional
Objeto del grupo: Estudios de transformaciones químicas catalizadas por enzimas mediante métodos híbridos QM/MM. Desarrollo de modelos multiescala para el estudio de sistemas químicos en fase condensada. Estudio de procesos químicos catalizados por ácidos nucleicos. Diseño computacional de biocatalizadores. Diseño computacional de inhibidores enzimáticos
Nombre del investigador/a principal (IP): Vicente Moliner Ibáñez **Nº de componentes grupo:** 10
Código normalizado: 272
Ciudad de radicación: Castellón de la Plana, Comunidad Valenciana, España
Entidad de afiliación: Universitat Jaume I
Fecha de inicio: 21/11/2013
- Nombre del grupo:** Química Teòrica i Computacional
Objeto del grupo: Las principales líneas de investigación del grupo, siempre dentro del campo de la química teórica y computacional, son
Nombre del investigador/a principal (IP): Juan Manuel Andrés Bort **Nº de componentes grupo:** 8
Código normalizado: 024
Ciudad de radicación: Castellón de la Plana, Comunidad Valenciana, España
Entidad de afiliación: Universitat Jaume I
Fecha de inicio: 29/07/2009 **Duración:** 52 meses

Actividad científica o tecnológica

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

- Nombre del proyecto:** ESTUDIO COMPUTACIONAL DEL MECANISMO DE LAS REACCIONES CATALIZADAS POR LA GLUCOPROTEÍNA CD38. DISEÑO DE NUEVOS INHIBIDORES.
Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació Local
Grado de contribución: Coordinador/a científico/a
Entidad de realización: Universitat Jaume I
Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Raquel Castillo Solsona
Nº de investigadores/as: 2
Entidad/es financiadora/s: Universitat Jaume I **Tipo de entidad:** UNIVERSIDAD
Ciudad entidad financiadora: Castelló de la Plana, España
Nombre del programa: CONVOCATÒRIA 2022 DE PROJECTES D'INVESTIGACIÓ CIENTÍFICA I DESENVOLUPAMENT TECNOLÒGIC. ACCIÓ 1.1 DEL PLA DE PROMOCIÓ DE LA INVESTIGACIÓ DE L'UJI * Modalitat B. Projectes per a grups d'investigació consolidats i investigadors individuals
Cód. según financiadora: UJI-B2022-12
Fecha de inicio-fin: 01/01/2023 - 31/12/2025 **Duración:** 36 meses

Cuantía total: 12.029,85

2 Nombre del proyecto: A COMBINED THEORETICAL AND EXPERIMENTAL APPROACH TO THE RATIONAL DESIGN OF HIGH VALUE CHEMICALS WITH IMPLICATIONS FOR BIOTHERAPEUTIC ENGINEERING

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació Autònomic

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Macarena Poyatos de Lorenzo; Vicente Moliner Ibáñez

Nº de investigadores/as: 11

Entidad/es financiadora/s:

Generalitat Valenciana CONSELLERIA
D'INNOVACIÓ, UNIVERSITATS, CIÈNCIA I
SOCIETAT DIGITAL

Tipo de entidad: ADMINISTRACIÓN AUTONÓMICA
- PRIVADO - NACIONAL

Ciudad entidad financiadora: València, España

Nombre del programa: CONVOCATÒRIA PER A L'ANY 2022 DE SUBVENCIONS DEL PROGRAMA PER A LA PROMOCIÓ DE LA INVESTIGACIÓ CIENTÍFICA, EL DESENVOLUPAMENT TECNOLÒGIC I LA INNOVACIÓ EN LA COMUNITAT VALENCIANA * Subvencions Programa per a grups d'investigació d'excel·lència (PROMETEU)

Cód. según financiadora: CIPROM/2021/079

Fecha de inicio-fin: 01/01/2022 - 31/12/2025

Duración: 48 meses

Cuantía total: 574.619,64

3 Nombre del proyecto: BIOCATALISIS COMPUTACIONAL: UNA APROXIMACIÓN AL DISEÑO RACIONAL DE INHIBIDORES ENZIMÁTICOS Y BIOCATALIZADORES CON APLICACIONES EN BIOMEDICINA

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació del Pla Estatal d'I+D+i

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Vicente Moliner Ibáñez

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

Agencia Estatal de Investigación

Tipo de entidad: ADMINISTRACIÓN CENTRAL -
PRIVADO - INTERNACIONAL

Ciudad entidad financiadora: Madrid, España

Nombre del programa: CONVOCATÒRIA DE TRAMITACIÓ ANTICIPADA PER A L'ANY 2021 DEL PROCEDIMENT DE CONCESSIÓ D'AJUDES A «PROJECTES DE GENERACIÓ DE CONEIXEMENT» EN EL MARC DEL PROGRAMA ESTATAL PER A IMPULSAR LA INVESTIGACIÓ CIENTÍFICO-TÈCNICA I LA SEUA TRANSFERÈNCIA, DEL PLA ESTATAL D'INVESTIGACIÓ CIENTÍFICA, TÈCNICA I D'INNOVACIÓ 2021-2023. * Projectes d'investigació Orientada

Cód. según financiadora: PID2021-123332OB-C21

Fecha de inicio-fin: 01/09/2022 - 31/08/2025

Duración: 36 meses

Cuantía total: 157.300

4 Nombre del proyecto: ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LA INHIBICIÓN DE PROTEÍNAS QUE PARTICIPAN EN EL DESARROLLO DE LA ENFERMEDAD DEL CÁNCER. DISEÑO DE NUEVOS FÁRMACOS.

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació Local

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): María Teresa Roca Moliner

Nº de investigadores/as: 2**Entidad/es financiadora/s:**

Universitat Jaume I

Tipo de entidad: UNIVERSIDAD**Ciudad entidad financiadora:** Castelló de la Plana, España**Nombre del programa:** CONVOCATÒRIA D'AJUTS DEL PLA DE PROMOCIÓ DE LA INVESTIGACIÓ DE LA UNIVERSITAT JAUME I DE CASTELLÓ PER A L'ANY 2019 * Modalitat B. Projectes per a grups d'investigació consolidats i investigadors individuals**Cód. según financiadora:** UJI-B2019-43**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2020 - 31/12/2022**Duración:** 36 meses**Cuantía total:** 15.017,08

- 5** **Nombre del proyecto:** QMCUBE: UNA PLATAFORMA UNIVERSAL PARA SIMULACIONES MULTIESCALA EN SISTEMAS BIOLÓGICOS. INTERPRETANDO Y PREDICIENDO LA ACTIVIDAD ENZIMÁTICA (QMCUBE)

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació del Pla Estatal d'I+D+i**Grado de contribución:** Investigador/a**Entidad de realización:** Universitat Jaume I**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Sergio Martí Forés; Vicente Moliner Ibáñez**Nº de investigadores/as:** 4**Entidad/es financiadora/s:**

MINISTERIO DE CIENCIA, INNOVACIÓN Y UNIVERSIDADES

Tipo de entidad: ADMINISTRACIÓN CENTRAL - PRIVADO - INTERNACIONAL**Ciudad entidad financiadora:** Madrid, España**Nombre del programa:** CONVOCATORIA 2018 DE AYUDAS A PROYECTOS DE I+D DEL SUBPROGRAMA ESTATAL DE GENERACIÓN DE CONOCIMIENTO. * Projectes Ciències matemàtiques, físiques, químiques i enginyeries (CMIFQ)**Cód. según financiadora:** PGC2018-094852-B-C21**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2019 - 30/06/2022**Duración:** 42 meses**Cuantía total:** 101.640**Régimen de dedicación:** Tiempo completo

- 6** **Nombre del proyecto:** DISEÑO COMPUTACIONAL DE NUEVOS BIOCATALIZADORES

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació Autònomic**Grado de contribución:** Investigador/a**Entidad de realización:** Universitat Jaume I**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Vicente Moliner Ibáñez**Nº de investigadores/as:** 4**Entidad/es financiadora/s:**

Generalitat Valenciana CONSELLERIA D'EDUCACIÓ, INVESTIGACIÓ, CULTURA...

Tipo de entidad: ADMINISTRACIÓN AUTONÓMICA - PRIVADO - NACIONAL**Ciudad entidad financiadora:** València, España**Nombre del programa:** CONVOCATÒRIA PER A L'ANY 2019 DE SUBVENCIONS DEL PROGRAMA PER A LA PROMOCIÓ DE LA INVESTIGACIÓ CIENTÍFICA, EL DESENVOLUPAMENT TECNOLÒGIC I LA INNOVACIÓ EN LA COMUNITAT VALENCIANA * Projectes per a grups consolidables**Cód. según financiadora:** AICO/2019/195**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2019 - 31/03/2021**Duración:** 27 meses**Cuantía total:** 36.000

- 7** **Nombre del proyecto:** ESTUDIO TEÓRICO DE MECANISMO DE REACCIÓN DE LAS ENZIMAS QUE CATALIZAN LA BIOSÍNTESIS DE NUCLEÓTIDOS Y BASES NITROGENADAS NUCLEICAS PARA EL DISEÑO DE NUEVOS INHIBIDORES

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació Local

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): María Teresa Roca Moliner

Nº de investigadores/as: 2

Entidad/es financiadora/s:

Universitat Jaume I

Tipo de entidad: UNIVERSIDAD

Ciudad entidad financiadora: Castelló de la Plana, España

Nombre del programa: CONVOCATORIA DE PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y DESARROLLO TECNOLÓGICO (ACCIÓN 1.1. DEL PLAN DE PROMOCIÓN DE LA INVESTIGACIÓN DE LA UJI 2016 * Modalitat B): Projectes d'investigació d'excel·lència

Cód. según financiadora: UJI-B2016-28

Fecha de inicio-fin: 01/01/2017 - 31/12/2019

Duración: 36 meses

Cuantía total: 16.038,36

8 Nombre del proyecto: MODELIZACIÓN MULTIESCALA DE REACCIONES QUÍMICAS EN ENTORNOS BIOLÓGICOS

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació del Pla Estatal d'I+D+i

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Vicente Moliner Ibáñez

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

MINISTERIO DE ECONOMIA Y COMPETITIVIDAD

Tipo de entidad: ADMINISTRACIÓN CENTRAL - PRIVADO - INTERNACIONAL

Ciudad entidad financiadora: Madrid, España

Nombre del programa: CONVOCATORIA 2015 DE AYUDAS DEL PROGRAMA ESTATAL DE FOMENTO DE LA INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA Y TÉCNICA DE EXCELENCIA-SUBPROGRAMA ESTATAL DE GENERACIÓN DE CONOCIMIENTO * Proyectos investigación CGL, CTM, CTQ, ENE, TRA.

Cód. según financiadora: CTQ2015-66223-C2-1-P

Fecha de inicio-fin: 01/01/2016 - 31/12/2018

Duración: 36 meses

Cuantía total: 105.512

Régimen de dedicación: Tiempo completo

9 Nombre del proyecto: DISEÑO RACIONAL DE NUEVOS MATERIALES MEDIANTE LA COMBINACIÓN DE TEORÍA, SIMULACIÓN Y EXPERIMENTO

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació Autònomic

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Manuel Andrés Bort

Nº de investigadores/as: 8

Entidad/es financiadora/s:

Generalitat Valenciana CONSELLERIA D'EDUCACIO, CULTURA I ESPORT

Tipo de entidad: ADMINISTRACIÓN AUTONÓMICA - PRIVADO - NACIONAL

Ciudad entidad financiadora: València, España

Nombre del programa: Convocatoria de diferentes tipos de becas y ayudas para el fomento de la investigación científica y el desarrollo tecnológico en la Comunidad Valenciana en 2014 * PROMETEU Fase II-Renovacions de les ajudes concedides en 2009 i 2010

Cód. según financiadora: PROMETEOII/2014/022

Fecha de inicio-fin: 01/01/2014 - 31/12/2017

Duración: 48 meses

Cuantía total: 216.345

10 Nombre del proyecto: ESTUDIO TEORICO DE LA CATALISIS ENZIMATICA APLICADA A SISTEMAS DEPENDIENTES DEL NAD⁺/NADH

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació Local

Grado de contribución: Coordinador/a científico/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Raquel Castillo Solsona

Nº de investigadores/as: 3

Entidad/es financiadora/s:

Universitat Jaume I

Tipo de entidad: UNIVERSIDAD

Ciudad entidad financiadora: Castelló de la Plana, España

Nombre del programa: CONVOCATORIA DE PROYECTOS DE INVESTIGACION CIENTIFICA Y DESARROLLO TECNOLÓGICO EN EL MARCO DEL PLAN DE PROMOCION DE LA INVESTIGACION DE LA UJI PARA EL AÑO 2013 * Modalitat B: Grups consolidats i investigadors individuals

Cód. según financiadora: P1-1B2013-58

Fecha de inicio-fin: 01/01/2014 - 31/12/2016

Duración: 36 meses

Cuántía total: 14.643

11 Nombre del proyecto: SIMULACIONES MOLECULARES DE PROCESOS CATALITICOS.DESARROLLOS Y APLICACIONES EN BIOMEDICINA Y BIOTECNOLOGIA (SIMOLPROCAT).

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació del Pla Estatal d'I+D+i

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Vicente Moliner Ibáñez

Nº de investigadores/as: 5

Entidad/es financiadora/s:

MINISTERIO DE ECONOMIA Y COMPETITIVIDAD

Tipo de entidad: ADMINISTRACIÓN CENTRAL - PRIVADO - INTERNACIONAL

Ciudad entidad financiadora: Madrid, España

Nombre del programa: CONVOCATORIA PARA EL AÑO 2012 DE CONCESION DE AYUDAS PARA PROYECTOS DE INVESTIGACION FUNDAMENTAL NO ORIENTADA EN EL MARCO DEL PLAN NACIONAL DE I+D+I 2008-2011 * 1º Termini àrees ANEP: TM,INF,ICI, IEL, IME, MTM,QMC, COM I TQ

Cód. según financiadora: CTQ2012-36253-C03-01

Fecha de inicio-fin: 01/01/2013 - 31/12/2015

Duración: 36 meses

Cuántía total: 91.260

Régimen de dedicación: Tiempo completo

12 Nombre del proyecto: SIMULACIONES MOLECULARES DE PROCESOS ACATALÍTICOS Y APLICACIONES EN BIOMEDICINAY BIOTECNOLOGÍA

Ámbito geográfico: Acció complementaria a projecte d'investigació

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Vicente Moliner Ibáñez

Nº de investigadores/as: 4

Entidad/es financiadora/s:

Generalitat Valenciana CONSELLERIA D'EDUCACIO, CULTURA I ESPORT

Tipo de entidad: ADMINISTRACIÓN AUTONÓMICA - PRIVADO - NACIONAL

Ciudad entidad financiadora: València, España



Nombre del programa: Convocatoria de diferentes tipos de becas y ayudas para el fomento de la investigación científica y el desarrollo tecnológico en la Comunidad Valenciana en 2014 * Ajudes complementàries per a projectes d'I+D

Cód. según financiadora: ACOMP/2014/277

Fecha de inicio-fin: 01/01/2014 - 14/11/2014

Duración: 10 meses - 14 días

Cuantía total: 1.000

- 13 Nombre del proyecto:** QUIMICA TEORICA Y COMPUTACIONAL DE SISTEMAS BIOLOGICOS, SOLIDOS Y DE MATERIALES MOLECULARES (QUITECOBISMM)

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació Autònomic

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Manuel Andrés Bort

Nº de investigadores/as: 8

Entidad/es financiadora/s:

Generalitat Valenciana CONSELLERIA D'EDUCACIO **Tipo de entidad:** ADMINISTRACIÓN AUTONÓMICA
- PRIVADO - NACIONAL

Ciudad entidad financiadora: València, España

Nombre del programa: Convocatoria de diferentes tipos de becas y ayudas para el fomento de la investigación científica y el desarrollo tecnológico en la Comunidad Valenciana * Programa Prometeu per a grups d'investigació d'excel·lència

Cód. según financiadora: PROMETEO/2009/053

Fecha de inicio-fin: 01/01/2009 - 31/12/2013

Duración: 60 meses

Cuantía total: 340.370

- 14 Nombre del proyecto:** MODELIZACION COMPUTACIONAL EN CATALISIS BIOLOGICA. APLICACIONES EN BIOMEDICINA Y BIOTECNOLOGIA

Ámbito geográfico: Acció complementaria a projecte d'investigació

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Vicente Moliner Ibáñez

Nº de investigadores/as: 10

Entidad/es financiadora/s:

Generalitat Valenciana CONSELLERIA D'EDUCACIO **Tipo de entidad:** ADMINISTRACIÓN AUTONÓMICA
- PRIVADO - NACIONAL

Ciudad entidad financiadora: València, España

Nombre del programa: Convocatoria de la Consellería de Educación de becas y ayudas para el fomento de la investigación científica y el desarrollo tecnológico en la Comunidad Valenciana * Ajudes complementàries per a projectes d'I+D+i

Cód. según financiadora: ACOMP/2012/119

Fecha de inicio-fin: 01/01/2012 - 31/12/2012

Duración: 12 meses

Cuantía total: 10.000

- 15 Nombre del proyecto:** MODELIZACION COMPUTACIONAL EN CATALISIS BIOLOGICA. APLICACIONES EN BIOMEDICINA Y BIOTECNOLOGIA. SOLICITUD: SPID200901X008026SV0SOLICITUD COORDINADO: SPID200901X014559CV0

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació del Pla Estatal d'I+D+i

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Vicente Moliner Ibáñez

Nº de investigadores/as: 14

**Entidad/es financiadora/s:**

MINISTERIO DE CIENCIA E INNOVACION

Tipo de entidad: ADMINISTRACIÓN CENTRAL -
PRIVADO - INTERNACIONAL**Ciudad entidad financiadora:** Madrid, España**Nombre del programa:** CONVOCATORIA DE AYUDAS PARA LA REALIZACION DE PROYECTOS DE INVESTIGACION Y ACCIONES COMPLEMENTARIAS EN EL MARCO DEL VI PLAN NACIONAL DE I+D+i 2008-2011. * Proyectos de investigación en las áreas TM, INF, ICI, IEL, IME, MTM, QMC, COM i TQ**Cód. según financiadora:** CTQ2009-14541-C02-01/BQU**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2010 - 31/12/2012**Duración:** 36 meses**Cuantía total:** 247.324**Régimen de dedicación:** Tiempo completo**16 Nombre del proyecto:** MODELIZACION COMPUTACIONAL EN CATALISIS BIOLOGICA. APLICACIONES EN BIOMEDICINA Y BIOTECNOLOGIA**Ámbito geográfico:** Acció complementaria a projecte d'investigació**Grado de contribución:** Investigador/a**Entidad de realización:** Universitat Jaume I**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Vicente Moliner Ibáñez**Nº de investigadores/as:** 11**Entidad/es financiadora/s:**Generalitat Valenciana CONSELLERIA D'EDUCACIO **Tipo de entidad:** ADMINISTRACIÓN AUTONÓMICA
- PRIVADO - NACIONAL**Ciudad entidad financiadora:** València, España**Nombre del programa:** Convocatoria de becas y ayudas para el fomento de la investigación científica y el desarrollo tecnológico en la Comunidad Valenciana * Ajudes complementàries per a projectes de I+D+i**Cód. según financiadora:** ACOMP/2011/038**Fecha de inicio-fin:** 01/01/2011 - 31/12/2011**Duración:** 12 meses**Cuantía total:** 5.000**17 Nombre del proyecto:** MECANISME MOLECULAR DE LES INTERACCIONS AMB BIOMOLECULES D'ESPECIES POTENCIALMENT CITOTOXIQUES DERIVADES DE L'ARTEMISINA: ESTUDI TEORIC DE L'ACCIO ANTIMALARIA**Ámbito geográfico:** Projecte d'Investigació Local**Grado de contribución:** Investigador/a**Entidad de realización:** Universitat Jaume I**Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...):** Vicente Sixto Safont Villarreal**Nº de investigadores/as:** 3**Entidad/es financiadora/s:**

Universitat Jaume I

Tipo de entidad: UNIVERSIDAD**Ciudad entidad financiadora:** Castelló de la Plana, España**Nombre del programa:** Plan de promoción de la investigación en la Universitat Jaume I de Castelló, 2008 * Projectes d'investigació científica i desenvolupament tecnològic (Consolidats)**Cód. según financiadora:** P1·1B2008-37**Fecha de inicio-fin:** 10/12/2008 - 09/12/2011**Duración:** 36 meses**Cuantía total:** 24.400**18 Nombre del proyecto:** ESTUDIOS TEORICOS Y COMPUTACIONALES DE SISTEMAS QUIMICOS EN FASES CONDENSADAS. CALCULOS QM/MM DE REACCIONES EN SISTEMAS BIOLOGICOS Y EN SOLIDOS**Ámbito geográfico:** Acció complementaria a projecte d'investigació**Grado de contribución:** Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Manuel Andrés Bort

Nº de investigadores/as: 8

Entidad/es financiadora/s:

Generalitat Valenciana CONSELLERIA D'EDUCACIO **Tipo de entidad:** ADMINISTRACIÓN AUTONÓMICA
- PRIVADO - NACIONAL

Ciudad entidad financiadora: València, España

Nombre del programa: Convocatoria de diferentes tipos de becas y ayudas para el fomento de la investigación científica y el desarrollo tecnológico en la Comunidad Valenciana * Ajudes complementàries per a projectes d'I+D+I

Cód. según financiadora: ACOMP/2009/121

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

Duración: 12 meses

Cuantía total: 10.000

- 19 Nombre del proyecto:** ESTUDIOS TEORICO COMPUTACIONALES DE SISTEMAS QUIMICOS EN FASES CONDENSADAS. CALCULOS QM/MM DE REACCIONES EN SISTEMAS BIOLOGICOS Y EN SOLIDOS - CODIGO SOLICITUD: 15447

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació del Pla Estatal d'I+D+i

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Manuel Andrés Bort

Nº de investigadores/as: 10

Entidad/es financiadora/s:

Ministerio de Educación, Cultura y Deporte

Tipo de entidad: ADMINISTRACIÓN CENTRAL -
PRIVADO - INTERNACIONAL

Ciudad entidad financiadora: Madrid, España

Nombre del programa: CONVOCATORIA DE PROYECTOS DE INVESTIGACION EN EL MARCO DE ALGUNOS PROGRAMAS NACIONALES DEL PLAN NACIONAL DE INVESTIGACION CIENTIFICA, DESARROLLO E INNOVACION TECNOLOGICA 2004-2007. * Programas Nacionales de Biotecnología, Biología Fundamental, Energía, Medios de Transporte, Construcción, Ciencias y Tecnologías Químicas, Diseño y Producción Industrial, Astronomía y Astrofísica, Matemáticas, Tecnologías Informáticas, y Ciencias Sociales, Económicas y Jurídicas.

Cód. según financiadora: CTQ2006-15447-C02-01/BQU

Fecha de inicio-fin: 01/10/2006 - 30/09/2009

Duración: 36 meses

Cuantía total: 72.600

Régimen de dedicación: Tiempo completo

- 20 Nombre del proyecto:** ESTUDI TEORIC DEL MECANISME D'ACCIO DE L'ARTEMISA I ELS SEUS DERIVATS CONTRA LA MALARIA

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació Local

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Vicente Sixto Safont Villarreal

Nº de investigadores/as: 3

Entidad/es financiadora/s:

Universitat Jaume I

Tipo de entidad: UNIVERSIDAD

Ciudad entidad financiadora: Castelló de la Plana, España

Nombre del programa: Plan de promoción de la investigación en la Universitat Jaume I, convocatoria 2005
* PROYECTOS DE INVESTIGACION MODALIDAD B (CONSOLIDADOS)

Cód. según financiadora: P1·1B2005-15

Fecha de inicio-fin: 01/12/2005 - 30/11/2008

Duración: 36 meses



Cuantía total: 19.900

- 21 Nombre del proyecto:** MODELOS COMPUTACIONALES DE SISTEMAS QUÍMICOS EN FASES CONDENSADAS. CÁLCULOS QM/MM DE REACCIONES EN SISTEMAS BIOLÓGICOS Y EN SÓLIDOS

Ámbito geográfico: Acció complementaria a projecte d'investigació

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Manuel Andrés Bort

Nº de investigadores/as: 10

Entidad/es financiadora/s:

Generalitat Valenciana CONSELLERIA D'EMPRESA, **Tipo de entidad:** ADMINISTRACIÓN AUTONÓMICA
UNIVERSITAT I CIENCIA - PRIVADO - NACIONAL

Ciudad entidad financiadora: València, España

Nombre del programa: Convocatoria de becas y ayudas para el fomento de la investigación científica y el desarrollo tecnológico en la Comunidad Valenciana * Ayudes complementaries per a projectes d'I+D+i

Cód. según financiadora: ACOMP07/108

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

Duración: 12 meses

Cuantía total: 9.000

- 22 Nombre del proyecto:** APLICACIONES DE NUEVAS TECNICAS QM/MM AL ESTUDIO DE SISTEMAS ENZIMATICOS

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació Autonòmic

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Sergio Martí Forés

Nº de investigadores/as: 3

Entidad/es financiadora/s:

Generalitat Valenciana DIRECCIO GENERAL
D'INVESTIGACIO I T.TECNOLOGICA

Tipo de entidad: ADMINISTRACIÓN AUTONÓMICA
- PRIVADO - NACIONAL

Ciudad entidad financiadora: València, España

Nombre del programa: Convocatoria de becas y ayudas para el fomento de la investigación científica y el desarrollo tecnológico en la Comunidad Valenciana * Projectes d'investigació per a investigadors emergents

Cód. según financiadora: GV06/016

Fecha de inicio-fin: 01/01/2006 - 31/12/2007

Duración: 24 meses

Cuantía total: 6.690

- 23 Nombre del proyecto:** ESTUDIOS TEORICOS Y COMPUTACIONALES DE REACCIONES QUIMICAS EN MEDIOS CONDENSADOS (SOLIDO, ACUOSO Y ENZIMATICO). DESARROLLO Y APLICACIONES DE METODOLOGIAS QM/MM (ESTECOMP)

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació del Pla Estatal d'I+D+i

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Juan Manuel Andrés Bort

Nº de investigadores/as: 8

Entidad/es financiadora/s:

MINISTERIO DE CIENCIA Y TECNOLOGIA

Tipo de entidad: ADMINISTRACIÓN CENTRAL -
PRIVADO - INTERNACIONAL

Ciudad entidad financiadora: Madrid, España

Nombre del programa: CONVOCATORIA DE AYUDAS PARA LA REALIZACION DE PROYECTOS DE I+D EN EL MARCO DE ALGUNOS PROGRAMAS NACIONALES DEL PLAN NACIONAL DE



INVESTIGACION CIENTIFICA, DESARROLLO E INNOVACION TECNOLOGICA 2000-2003. * Proyectos de Investigación en el marco de algunos Programas Nacionales.

Cód. según financiadora: BQU2003-04168-C03-03

Fecha de inicio-fin: 15/11/2003 - 14/11/2006

Duración: 36 meses

Cuantía total: 107.770

Régimen de dedicación: Tiempo completo

24 Nombre del proyecto: PERFECCIONAMIENTO DE METODOS DE CALCULO, EXTENDIENDO LA METODOLOGIA HIBRIDA QM/MM. APLICACION A SISTEMAS ENZIMATICOS

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació Autònomic

Grado de contribución: Coordinador/a científico/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Raquel Castillo Solsona

Nº de investigadores/as: 3

Entidad/es financiadora/s:

Generalitat Valenciana CONSELLERIA DE CULTURA, EDUCACIO I ESPORT

Tipo de entidad: ADMINISTRACIÓN AUTONÓMICA
- PRIVADO - NACIONAL

Ciudad entidad financiadora: València, España

Nombre del programa: Convocatoria de varias ayudas y becas para el fomento de la investigación científica y el desarrollo tecnológico en la Comunidad Valenciana * Projectes d'investigació científica i desenvolupament tecnològic (Modalitat A)

Cód. según financiadora: GV04A/702

Fecha de inicio-fin: 01/01/2004 - 01/01/2006

Duración: 24 meses

Cuantía total: 5.900

25 Nombre del proyecto: ESTUDIS TEORICS DE MECANISMES DE REACCIO EN ENZIMS UTILITZANT UNA COMBINACIO DE METODS ESTADISTICS I METODS HIBRIDS D'OPTIMITZACIO MECANICA MOLECULAR / MECANICA QUANTICA

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació Local

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Vicente Moliner Ibáñez

Nº de investigadores/as: 5

Entidad/es financiadora/s:

Fundación Bancaja

Tipo de entidad:
ASOCIACIÓN/FUNDACIÓN-PRIVADO-INTERNACIONAL

Ciudad entidad financiadora: València, España

Nombre del programa: PLAN DE PROMOCION DE LA INVESTIGACION 2002 * PROGRAMA DE FOMENTO DE PROYECTOS DE INVESTIGACION - MODALITAT B (GRUPOS DE INVESTIGACION CONSOLIDADOS)

Cód. según financiadora: P1·1B2002-02

Fecha de inicio-fin: 15/11/2002 - 15/11/2005

Duración: 36 meses

Cuantía total: 10.821

26 Nombre del proyecto: APLICACION DE METODOS HIBRIDOS QM/MM, METODOS ESTADISTICOS Y TEORIA VARIACIONAL DEL ESTADO DE TRANSICION A DIVERSOS SISTEMAS ENZIMATICOS

Ámbito geográfico: Projecte d'Investigació Autònomic

Grado de contribución: Investigador/a

Entidad de realización: Universitat Jaume I

Nombres investigadores principales (IP, Co-IP,...): Mónica Oliva Domínguez

Nº de investigadores/as: 2

**Entidad/es financiadora/s:**

Generalitat Valenciana CONSELLERIA
D'INNOVACIÓ I COMPETITIVITAT

Tipo de entidad: ADMINISTRACIÓN AUTONÓMICA
- PRIVADO - NACIONAL

Ciudad entidad financiadora: València, España

Nombre del programa: CONVOCATÒRIA D'AJUDES PER A PROJECTES D'INVESTIGACIÓ I
DESENVOLUPAMENT DE LA GENERALITAT VALENCIANA. * Projectes d'investigació dirigits per joves
investigadors

Cód. según financiadora: CTIDIA/2002/214

Fecha de inicio-fin: 01/01/2002 - 31/12/2003

Duración: 24 meses

Cuántía total: 11.772,85

Actividades científicas y tecnológicas

Producción científica

Publicaciones, documentos científicos y técnicos

- 1** Gerardo Alfonso Perez; Raquel Castillo Solsona. Gene Identification in Inflammatory Bowel Disease via a Machine Learning Approach. MEDICINA SPORTIVA. 59, pp. 1 - 15. (Polonia): 2023. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.3390/medicina59071218>>. ISSN 1429-0022
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 2
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
- 2** Gerardo Alfonso Perez; Raquel Castillo Solsona. Nonlinear Techniques and Ridge Regression as a Combined Approach: Carcinoma Identification Case Study. MATHEMATICS. 11, pp. 1 - 12. (Suiza): 2023. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.3390/math11081795>>. ISSN 2227-7390
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 2
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
- 3** Gerardo Alfonso Perez; Raquel Castillo Solsona. Categorical Variable Mapping Considerations in Classification Problems: Protein Application. MATHEMATICS. 11, pp. 1 - 25. (Suiza): 2023. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.3390/math11020279>>. ISSN 2227-7390
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 2
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
- 4** Gerardo Alfonso Perez; Raquel Castillo Solsona. Identification of Systemic Sclerosis through Machine Learning Algorithms and Gene Expression. MATHEMATICS. 10, pp. 1 - 13. (Suiza): 2022. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.3390/math10244632>>. ISSN 2227-7390
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 2
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 2.4
Categoría: Science Edition - MATHEMATICS
Revista dentro del 25%: Si

- 5** Alberto Pla López; Raquel Castillo Solsona; Rocío Cejudo Marín; Olaya García-Pedrero; Mariam Bakir-Laso; Eva Falomir Ventura; Pedro Miguel Carda Usó. Synthesis and Biological Evaluation of Small Molecules as Potential Anticancer Multitarget Agents. INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES. 23, pp. 1 - 19. (Suiza): 2022. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.3390/ijms23137049>>. ISSN 1422-0067
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 2
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
- 6** Alexander Nodling; Nicolo Santi; Raquel Castillo Solsona; Magdalena Lipka-Lloyd; Louis C. Morrill; Katarzyna Patrycja Swiderek; Vicente Moliner Ibáñez; Louis Y. P. Luk. The role of streptavidin and its variants in catalysis by biotinylated secondary amines. ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY. 19, pp. 10424 - 10431. (Reino Unido): 2021. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/d1ob01947c>>. ISSN 1477-0520
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 3
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.89
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, ORGANIC
Revista dentro del 25%: Si
- 7** María Teresa Roca Moliner; José Javier Ruiz Pernia; Raquel Castillo Solsona; Mónica Oliva Domínguez; Vicente Moliner Ibáñez. Temperature dependence of dynamic, tunnelling and kinetic isotope effects in formate dehydrogenase. PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS. 20, pp. 25722 - 25737. (Reino Unido): 2018. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/c8cp04244f>>. ISSN 1463-9076
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 3
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.567
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.567
Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL
Revista dentro del 25%: Si
- 8** Alexander R. Nödling; Katarzyna Patrycja Swiderek; Raquel Castillo Solsona; Jonathan W. Hall; Antonio Angelastro; Louis C. Morrill; Yi Jin; Yu-Hsuan Tsai; Vicente Moliner Ibáñez; Louis Y.P. Luk. Reactivity and Selectivity of Iminium Organocatalysis Improved by a Protein Host. ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION. 57, pp. 12478 - 12482. (Alemania): 2018. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/anie.201806850>>. ISSN 1433-7851
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 3
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 12.257
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
- 9** Isabel Bordes Pastor; Eduardo Garcia Junceda; Isabel Sánchez Moreno; Raquel Castillo Solsona; Vicente Moliner Ibáñez. Computational Study of the Phosphoryl Donor Activity of Dihydroxyacetone Kinase from ATP to Inorganic Polyphosphate. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 118, pp. 1 - 15. (Estados Unidos de América): 2018. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/qua.25520>>. ISSN 0020-7608
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 4
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Fuente de impacto: WOS (JCR)
Categoría: Otros

Índice de impacto: 2.263

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.263

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.263

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.263

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.263

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.263

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 2.263

Revista dentro del 25%: No

Categoría: Science Edition - MATHEMATICS, INTERDISCIPLINARY APPLICATIONS

Revista dentro del 25%: Si

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Categoría: Science Edition - MATHEMATICS, INTERDISCIPLINARY APPLICATIONS

Revista dentro del 25%: Si

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

Categoría: Science Edition - PHYSICS, ATOMIC, MOLECULAR & CHEMICAL

Revista dentro del 25%: No

- 10** Isabel Bordes Pastor; Raquel Castillo Solsona; Vicente Moliner Ibáñez. Theoretical Study of the Phosphoryl Transfer Reaction from ATP to Dha Catalyzed by DhaK from Escherichia coli. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 121, pp. 8878 - 8892. (Estados Unidos de América): 2017. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcb.7b04862>>. ISSN 1520-6106

Tipo de producción: Artículo

Posición de firma: 2

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.146

Tipo de soporte: Revista

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

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL

Revista dentro del 25%: No

- 11** I. Sánchez Moreno; Isabel Bordes Pastor; Raquel Castillo Solsona; José Javier Ruiz Pernia; Vicente Moliner Ibáñez; E. García Junceda. Tuning the Phosphoryl Donor Specificity of Dihydroxyacetone Kinase from ATP to Inorganic Polyphosphate. An Insight from Computational Studies. INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES. 16, pp. 27835 - 27849. (Suiza): 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.3390/ijms161126073>>. ISSN 1422-0067

Tipo de producción: Artículo

Posición de firma: 3

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.257

Fuente de impacto: WOS (JCR)

Índice de impacto: 3.257

Tipo de soporte: Revista

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

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY

Revista dentro del 25%: No

Categoría: Science Edition - BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY

Revista dentro del 25%: No

- 12** Ignacio Viciano Gonzalo; Raquel Castillo Solsona; Sergio Martí Forés. QM/MM modeling of the hydroxylation of the androstenedione substrate catalyzed by cytochrome P450 aromatase (CYP19A1). JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY. 36, pp. 1736 - 1747. (Estados Unidos de América): 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/jcc.23967>>. ISSN 0192-8651

**Tipo de producción:** Artículo**Posición de firma:** 2**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.648**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si

- 13** Isabel Bordes Pastor; José Javier Ruiz Pernia; Raquel Castillo Solsona; Vicente Moliner Ibáñez. A Computational Study of the Phosphoryl Transfer Reaction between ATP and Dha in Aqueous Solution. ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY. 13, pp. 10179 - 10190. (Reino Unido): 2015. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/c5ob01079a>>. ISSN 1477-0520

Tipo de producción: Artículo**Posición de firma:** 3**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.559**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, ORGANIC**Revista dentro del 25%:** Si

- 14** Violeta López; José Javier Ruiz Pernia; Raquel Castillo Solsona; Vicente Moliner Ibáñez; Iñaki Tuñón. Hydrolysis of phosphotriesters: A theoretical analysis of the enzymatic and solution mechanisms. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 18, pp. 9612 - 9621. (Alemania): 2012. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/chem.201103615>>. ISSN 0947-6539

Tipo de producción: Artículo**Posición de firma:** 3**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 5.831**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY**Revista dentro del 25%:** Si

- 15** J.I. Mujika; X. Lopez; E. Rezabal; Raquel Castillo Solsona; Sergio Martí Forés; Vicente Moliner Ibáñez; J.M. Ugalde. A QM/MM study of the complexes formed by aluminum and iron with serum transferrin at neutral and acidic pH. JOURNAL OF INORGANIC BIOCHEMISTRY. 105, pp. 1446 - 1456. 2011. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2011.07.019>>. ISSN 0162-0134

Tipo de producción: Artículo**Posición de firma:** 4**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.354**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 3.354**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Categoría:** Science Edition - BIOCHEMISTRY & MOLECULAR BIOLOGY**Revista dentro del 25%:** No**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, INORGANIC & NUCLEAR**Revista dentro del 25%:** Si

- 16** Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort. A DFT Study of the Reactivity Indexes of Ionic (4 + 2+) Diels-Alder Cycloaddition to Nitrilium and Immonium Ions. LETTERS IN ORGANIC CHEMISTRY. 8, pp. 104 - 107. 2011. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.2174/157017811794697449>>. ISSN 1570-1786

Tipo de producción: Artículo**Posición de firma:** 1**Fuente de impacto:** WOS (JCR)**Índice de impacto:** 0.822**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo**Categoría:** Science Edition - CHEMISTRY, ORGANIC**Revista dentro del 25%:** No

- 17** Jeronimo Lameira; Claudio Nahum; Vicente Moliner Ibáñez; Sergio Martí Forés; Raquel Castillo Solsona; Iñaki Tuñón. Quantum Mechanical/Molecular Mechanical Molecular Dynamics Simulation of Wild-Type and Seven Mutants of CpNag.J in Complex with PUGNAc. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 114, pp. 7029 - 7036. (Estados Unidos de América): 2010. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1021/jp9115673>>. ISSN 1520-6106
- Tipo de producción:** Artículo
Posición de firma: 5
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.603
- Tipo de soporte:** Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: No
- 18** María Teresa Roca Moliner; Mónica Oliva Domínguez; Raquel Castillo Solsona; Vicente Moliner Ibáñez; Iñaki Tuñón. Do Dynamic Effects Play a Significant Role in Enzymatic Catalysis? A Theoretical Analysis of Formate Dehydrogenase. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 16, pp. 11399 - 11411. (Alemania): 2010. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/chem.201000635>>. ISSN 0947-6539
- Tipo de producción:** Artículo
Posición de firma: 3
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)
Índice de impacto: 5.476
- Tipo de soporte:** Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, MULTIDISCIPLINARY
Revista dentro del 25%: Si
- 19** Daniel R. Ramos; Raquel Castillo Solsona; Moisés Canle L.; M. Victoria García; Juan Manuel Andrés Bort; J. Arturo Santaballa. A theoretical study of the mechanism of the base-promoted decomposition of N-chloro,N-methylethanolamine. ORGANIC & BIOMOLECULAR CHEMISTRY. 7, pp. 1807 - 1814. (Reino Unido): 2009. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1039/b820006h>>. ISSN 1477-0520
- Tipo de producción:** Artículo
Posición de firma: 2
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)
Índice de impacto: 3.762
- Tipo de soporte:** Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, ORGANIC
Revista dentro del 25%: Si
- 20** Raquel Castillo Solsona; Mónica Oliva Domínguez; Sergio Martí Forés; Vicente Moliner Ibáñez. A theoretical study of the catalytic mechanism of formate dehydrogenase. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 112, pp. 10012 - 10022. (Estados Unidos de América): 2008. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1021/jp8025896>>. ISSN 1520-6106
- Tipo de producción:** Artículo
Posición de firma: 1
- Fuente de impacto:** WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.189
- Tipo de soporte:** Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si
- 21** Claudio Nahum; Sergio Martí Forés; Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort; Vicente Moliner Ibáñez; Inaki Tuñón; Estanislao Silla. A quantum mechanic/molecular mechanic study of the wild type and N155S mutant HIV-1 integrase complexed with diketo acid. BIOPHYSICAL JOURNAL. 94, pp. 2443 - 2451. (Reino Unido): 2008. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1529/biophysj.107.107623>>. ISSN 0006-3495
- Tipo de producción:** Artículo
Posición de firma: 3
- Tipo de soporte:** Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo



Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.683

Categoría: Science Edition - BIOPHYSICS
Revista dentro del 25%: Si

- 22** Raquel Castillo Solsona; María Teresa Roca Moliner; Alejandro Soriano; Vicente Moliner Ibáñez; Iñaki Tuñón. Using grote-hynes theory to quantify dynamical effects on the reaction rate of enzymatic processes. The case of methyltransferases. JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B. 112, pp. 529 - 534. (Estados Unidos de América): 2008. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1021/jp077660b>>. ISSN 1520-6106

Tipo de producción: Artículo

Posición de firma: 1

Tipo de soporte: Revista

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

Fuente de impacto: WOS (JCR)
Índice de impacto: 4.189

Categoría: Science Edition - CHEMISTRY, PHYSICAL
Revista dentro del 25%: Si

- 23** Cláudio N. Alves; Sergio Martí Forés; Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort; Vicente Moliner Ibáñez; Iñaki Tuñón; Estanislao Silla. Calculation of binding energy using BLYP/MM for the HIV-1 integrase complexed with the S-1360 and two analogues. BIOORGANIC & MEDICINAL CHEMISTRY. 15, pp. 3818 - 3824. 2007. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.bmc.2007.03.027>>. ISSN 0968-0896

Tipo de producción: Artículo

Posición de firma: 3

Tipo de soporte: Revista

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

- 24** Cláudio N. Alves; Sergio Martí Forés; Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort; Vicente Moliner Ibáñez; Iñaki Tuñón; Estanislao Silla. A quantum mechanics/molecular mechanics study of the protein-ligand interaction for inhibitors of HIV-1 integrase. CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL. 13, pp. 7715 - 7724. (Alemania): 2007. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/chem.200700040>>. ISSN 0947-6539

Tipo de producción: Artículo

Posición de firma: 3

Tipo de soporte: Revista

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

- 25** Doris Guerra; Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort; P. Fuentealba; A. Aizman; R. Contreras. Homofugality: a new reactivity index describing the leaving group ability in homolytic substitution reactions. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. pp. 437 - 442. (Holanda): 2006. ISSN 0009-2614

Tipo de producción: Artículo

Posición de firma: 2

Tipo de soporte: Revista

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

- 26** D.R. Ramos; Raquel Castillo Solsona; M. Canle L.; M.V. García; Juan Manuel Andrés Bort; J.A. Santaballa. Density functional study on the Hoffmann elimination of (N-Cl), N-methylethanolamine in gas phase and in aqueous solution. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 429, pp. 425 - 429. (Holanda): 2006. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2006.08.055>>. ISSN 0009-2614

Tipo de producción: Artículo

Posición de firma: 2

Tipo de soporte: Revista

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

- 27** Alejandro Soriano; Raquel Castillo Solsona; Chisto Christov; Juan Manuel Andrés Bort; Vicente Moliner Ibáñez. Catalysis in glycine N-methyltransferase. Testing electrostatic stabilization and compression hypothesis. BIOCHEMISTRY. 45, pp. 14917 - 14925. (Estados Unidos de América): 2006. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1021/bi061319k>>. ISSN 0006-2960

Tipo de producción: Artículo

Posición de firma: 2

Tipo de soporte: Revista

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

- 28** R. Contreras; Juan Manuel Andrés Bort; L.R. Domingo; Raquel Castillo Solsona; P. Pérez. Effect of electron-withdrawing substituents on the electrophilicity of carbonyl carbons. *TETRAHEDRON*. 61, pp. 417 - 422. (Reino Unido): 2005. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.tet.2004.10.085>>. ISSN 0040-4020
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 4
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
- 29** Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort; L.R. Domingo. Lewis Acid Mediated Reaction between 2-cyclohexenone and methyl azide. A DFT study. *EUROPEAN JOURNAL OF ORGANIC CHEMISTRY*. pp. 4705 - 4709. (Alemania): 2005. ISSN 1434-193X
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 1
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
- 30** Vicente Sixto Safont Villarreal; Juan Manuel Andrés Bort; Raquel Castillo Solsona; Gabriel Chuchani; Alexandra Rotinov; Rosa M. Domínguez; A. Herize. A Joint Experimental and Theoretical Study on the Mechanisms of Methyl-2-Hydroxypropionate and Methyl-2-Hydroxyisobutyrate Decomposition in Gas Phase. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY A*. 108, pp. 996 - 1007. (Estados Unidos de América): 2004. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1021/jp030985h>>. ISSN 1089-5639
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 3
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
- 31** Victor Polo; Juan Manuel Andrés Bort; Raquel Castillo Solsona; Slawomir Berski; Bernard Silvi. Understanding the Molecular Mechanism of the 1,3-Dipolar Cycloaddition between Fulminic Acid and Acetylene in Terms of the Electron Localization Function and Catastrophe Theory. *CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL*. 10, pp. 5165 - 5172. (Alemania): 2004. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1002/chem.200400161>>. ISSN 0947-6539
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 3
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
- 32** Raquel Castillo Solsona; Estanislao Silla; Iñaki Tuñón. Role of Protein Flexibility in Enzymatic Catalysis: Quantum Mechanical-Molecular Mechanical Study of the Deacylation Reaction in Class A β -Lactamases. *JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY*. pp. 1809 - 1816. (Estados Unidos de América): 2002. ISSN 0002-7863
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 1
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
- 33** Raquel Castillo Solsona; Mónica Oliva Domínguez; Sergio Martí Forés; Vicente Moliner Ibáñez; I. Tuñón; Juan Manuel Andrés Bort. Hybrid QM/MM Studies on Chemical Reactivity. Recent Research Developments in Quantum Chemistry, Vol 3. pp. 51 - 74. IndiaTransworld Research Network, 2002. ISBN 817895043X
Tipo de producción: Capítulos de libros
Posición de firma: 1
Tipo de soporte: Libro
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de capítulo de libro
- 34** Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort; Vicente Moliner Ibáñez. Quantum Mechanical/Molecular Mechanical Study on the Favorskii Rearrangement in Aqueous Media. *JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY B*. 105, pp. 2453 - 2460. (Estados Unidos de América): 2001. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1021/jp003264g>>. ISSN 1520-6106
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 1
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

- 35** Raquel Castillo Solsona; Vicente Moliner Ibáñez; Juan Manuel Andrés Bort. A Theoretical Study on the Molecular Mechanism for the Normal Reimer-Tiemann Reaction. CHEMICAL PHYSICS LETTERS. 318, pp. 270 - 275. (Holanda): 2000. Disponible en Internet en: <[http://dx.doi.org/10.1016/S0009-2614\(00\)00005-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0009-2614(00)00005-1)>. ISSN 0009-2614
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 1
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
- 36** Mónica Oliva Domínguez; Vicente Sixto Safont Villarreal; Juan Manuel Andrés Bort; Raquel Castillo Solsona; Vicente Moliner Ibáñez. Theoretical Study on the Molecular Mechanism of the Domino Pathways for the Squarate Ester Sequential Reactions. JOURNAL OF PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. 12, pp. 61 - 68. (Reino Unido): 1999. Disponible en Internet en: <[http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1099-1395\(199901\)12:1<61::AID-POC93>3.3.CO;2-X](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1099-1395(199901)12:1<61::AID-POC93>3.3.CO;2-X)>. ISSN 0894-3230
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 5
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
- 37** Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort; Vicente Moliner Ibáñez. Catalytic Mechanism of Dihydrofolate Reductase Enzyme. A Combined Quantum-Mechanical/Molecular Mechanical Characterisation of Transition State Structure for the Hydride Transfer Step. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 121, pp. 12140 - 12147. (Estados Unidos de América): 1999. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1021/ja9843019>>. ISSN 0002-7863
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 1
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
- 38** Raquel Castillo Solsona; Vicente Moliner Ibáñez; Juan Manuel Andrés Bort; Mónica Oliva Domínguez; Vicente Sixto Safont Villarreal. Theoretical Investigation of the Abnormal Reimer-Tiemann Reaction. JOURNAL OF PHYSICAL ORGANIC CHEMISTRY. 11, pp. 670 - 677. (Reino Unido): 1998. Disponible en Internet en: <[http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1099-1395\(199808/09\)11:8/9<670::AID-POC56>3.0.CO;2-U](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1099-1395(199808/09)11:8/9<670::AID-POC56>3.0.CO;2-U)>. ISSN 0894-3230
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 1
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
- 39** Raquel Castillo Solsona; Vicente Moliner Ibáñez; Vicente Sixto Safont Villarreal; Mónica Oliva Domínguez; Juan Manuel Andrés Bort. A PM3 Semiempirical Study of the Molecular Mechanism for the Favorskii Rearrangement of the α -Chlorocyclobutanone. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM. 426, pp. 299 - 306. (Holanda): 1998. Disponible en Internet en: <[http://dx.doi.org/10.1016/S0166-1280\(97\)00330-8](http://dx.doi.org/10.1016/S0166-1280(97)00330-8)>. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 1
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
- 40** Vicente Sixto Safont Villarreal; Vicente Moliner Ibáñez; Mónica Oliva Domínguez; Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort. A Theoretical Study of the Addition of CH_3MgCl to Chiral α -Alkoxy Carbonyl Compounds. JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE-THEOCHEM. 426, pp. 263 - 275. (Holanda): 1998. Disponible en Internet en: <[http://dx.doi.org/10.1016/S0166-1280\(97\)00328-X](http://dx.doi.org/10.1016/S0166-1280(97)00328-X)>. ISSN 0166-1280
Tipo de producción: Artículo
Posición de firma: 4
Tipo de soporte: Revista
Grado de contribución: Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo
- 41** Mónica Oliva Domínguez; Vicente Sixto Safont Villarreal; Juan Manuel Andrés Bort; Raquel Castillo Solsona; Vicente Moliner Ibáñez. Understanding the Mechanism of the Addition of Organomagnesium Reagents to 2-hydroxypropanal. An Ab Initio Molecular Orbital Analysis. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 65, pp. 719 - 728. (Estados Unidos de América): 1997. Disponible en Internet en: <[http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-461X\(1997\)65:5<719::AID-QUA38>3.0.CO;2-U](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1097-461X(1997)65:5<719::AID-QUA38>3.0.CO;2-U)>. ISSN 0020-7608

**Tipo de producción:** Artículo**Posición de firma:** 4**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

- 42** Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort; Vicente Moliner Ibáñez; Vicente Sixto Safont Villarreal; Mónica Oliva Domínguez. A Semiempirical Study on the Ring Opening Process for the Cyclopropanone, 2,2-Dimethylcyclopropanone, trans-2,3-Di-tert-Butylcyclopropanone and Spiro(bicyclo[2.2.1]heptane-2.1'-cyclopropan)-2'-one Sys. INTERNATIONAL JOURNAL OF QUANTUM CHEMISTRY. 65, pp. 729 - 738. (Estados Unidos de América): 1997. Disponible en Internet en: <[http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1097-461X\(1997\)65:5<729::AID-QUA39>3.0.CO;2-U](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1097-461X(1997)65:5<729::AID-QUA39>3.0.CO;2-U)>. ISSN 0020-7608

Tipo de producción: Artículo**Posición de firma:** 1**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

- 43** Vicente Moliner Ibáñez; Raquel Castillo Solsona; Vicente Sixto Safont Villarreal; Mónica Oliva Domínguez; Juan Manuel Andrés Bort. A Theoretical Study of the Favorskii Rearrangement. Calculation of Gas-Phase Reaction Paths and Solvation Effects on the Molecular Mechanism for the Transposition of α -Chlorocyclobutanone. JOURNAL OF THE AMERICAN CHEMICAL SOCIETY. 119, pp. 1941 - 1947. (Estados Unidos de América): 1997. Disponible en Internet en: <<http://dx.doi.org/10.1021/ja962571q>>. ISSN 0002-7863

Tipo de producción: Artículo**Posición de firma:** 2**Tipo de soporte:** Revista**Grado de contribución:** Autor/a o coautor/a de artículo en revista con comité evaluador de admisión externo

Trabajos presentados en congresos nacionales o internacionales

- 1** **Título del trabajo:** Computational Study of inhibitors targeting PD-L1 and VEGFR-2 protein
Nombre del congreso: 12th Congress on Electronic Structure Principles and Applications
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Ciudad de celebración: Vigo, España
Fecha de celebración: 21/06/2022
 Raquel Castillo Solsona. En: 12th Congress on Electronic Structure Principles and Applications.
- 2** **Título del trabajo:** Forecasting of Protein Shape Characteristics
Nombre del congreso: 3rd International Conference on Chemical Engineering and Biotechnology (ICCEB 2021)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Ciudad de celebración: Shanghai, China
Fecha de celebración: 13/11/2021
 Gerardo Alfonso Perez; Raquel Castillo Solsona. En: 3rd International Conference on Chemical Engineering and Biotechnology (ICCEB 2021).
- 3** **Título del trabajo:** Molecular Simulations of Iminium Organocatalysis anchored to Streptavidin
Nombre del congreso: XXXVII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Ciudad de celebración: Donostia - San Sebastian, España
Fecha de celebración: 26/05/2019
Entidad organizadora: Real Sociedad Española de Química
 A.R. Nodling; L.Y.P. Luk; Katarzyna Patrycja Swiderek; Vicente Moliner Ibáñez; Raquel Castillo Solsona. En: XXXVII Reunión Bienal de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ).

- 4** **Título del trabajo:** QM/MM theoretical studies of enzyme catalyzed reactions
Nombre del congreso: 6th International Iberian Biophysics Congress X Iberoamerican Congress of Biophysics (2018 IIBC)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de celebración: Castelló, España
Fecha de celebración: 22/06/2018
Entidad organizadora: Universitat Jaume I
Forma de contribución: Artículo
Vicente Moliner Ibáñez; Sergio Martí Forés; Raquel Castillo Solsona; Katarzyna Patrycja Swiderek; María Teresa Roca Moliner; Kemel Arafet Cruz; Manuel Delgado; Daria De Raffele; Natalia Serrano Aparicio. En: 6th International Iberian Biophysics Congress X Iberoamerican Congress of Biophysics (2018 IIBC). pp. 73 - 73. (España): 2018. Disponible en Internet en: <https://www.uv.es/biophys/sbe/S/book_of_abstracts_S2.pdf>. ISSN 2445-4311
- 5** **Título del trabajo:** New theoretical insights into the mechanism of human aromatase (CYP19A1). Exploration of its hitherto unknown second catalytic subcycle
Nombre del congreso: 10th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA2016)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Ciudad de celebración: Castellón, España
Fecha de celebración: 28/06/2016
Ignacio Viciano Gonzalo; Raquel Castillo Solsona; Sergio Martí Forés. En: 10th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA2016).
- 6** **Título del trabajo:** Substrate-assisted versus asp-assisted phosphoryl transfer mechanism in dihydroxyacetone kinase
Nombre del congreso: ESPA2016
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Ciudad de celebración: Castelló, España
Fecha de celebración: 28/06/2016
Isabel Bordes Pastor; Raquel Castillo Solsona; Vicente Moliner Ibáñez. En: ESPA2016.
- 7** **Nombre del congreso:** 10th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA2016)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Comité organizador
Ciudad de celebración: Castellón, España
Fecha de celebración: 28/06/2016
Juan Manuel Andrés Bort; Armando Beltrán Flors; Vicente Moliner Ibáñez; Vicente Sixto Safont Villarreal; Raquel Castillo Solsona; Silvia Ferrer Castillo; Lourdes Gracia Edo; Rosa María Llusar Barelles; Sergio Martí Forés; Mónica Oliva Domínguez; José Javier Ruiz Pernia; María Teresa Roca Moliner. En: 10th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA2016).
- 8** **Título del trabajo:** A QM/MM Study of Phosphate transfer to Dihydroxyacetone in Dihydroxyacetone Kinase from Escherichia Coli (Pòsster)
Nombre del congreso: 7th International Theoretical Biophysics Symposium (THEOBIO2015)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de celebración: Cagliari, Italia
Fecha de celebración: 08/06/2015
Isabel Bordes Pastor; Raquel Castillo Solsona; José Javier Ruiz Pernia; Vicente Moliner Ibáñez. En: 7th International Theoretical Biophysics Symposium (THEOBIO2015).



- 9** **Título del trabajo:** A QM/MM Study of Phosphate Transfer to Dihydroxyacetone in Aqueous Solution
Nombre del congreso: 9th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. (ESPA 2014)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Ciudad de celebración: Badajoz, España
Fecha de celebración: 02/07/2014
Isabel Bordes Pastor; Raquel Castillo Solsona; José Javier Ruiz Pernia; Vicente Moliner Ibáñez. En: 9th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications. (ESPA 2014).
- 10** **Título del trabajo:** Effects of possible mutations in dihydroxyacetone kinase using inorganic polyphosphate as phosphate donor
Nombre del congreso: XXXIX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2013)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Ciudad de celebración: Granada, España
Fecha de celebración: 30/06/2013
Forma de contribución: Capítulos de libros
Isabel Bordes Pastor; Raquel Castillo Solsona; José Javier Ruiz Pernia; Vicente Moliner Ibáñez; E. García-Junceda. En: XXXIX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2013). (España): Instituto Andaluz de Ciencias de la Tierra, 2013. ISBN 9788469581513
- 11** **Título del trabajo:** Estudio teórico QM/MM de la hidroxilación de sustratos catalizada por el Citocromo P450 Aromatasa (CYP19A1)
Nombre del congreso: XXXVIII Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de celebración: Natal, Brasil
Fecha de celebración: 02/12/2012
Ignacio Viciano Gonzalo; Raquel Castillo Solsona; Sergio Martí Forés. En: XXXVIII Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression.
- 12** **Título del trabajo:** Electron transference pathways analysis in Trypsin-solubilized bovine liver cytochrome b5
Nombre del congreso: 8th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Ciudad de celebración: Barcelona, España
Fecha de celebración: 26/06/2012
Isabel Bordes Pastor; Raquel Castillo Solsona; José Javier Ruiz Pernia; Vicente Moliner Ibáñez; Aurelien de la Lande. En: 8th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications.
- 13** **Título del trabajo:** Theoretical study of molecular mechanism of α,β -Epoxyesters
Nombre del congreso: Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2011)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela,
Fecha de celebración: 17/07/2011
Isabel Bordes Pastor; José Javier Ruiz Pernia; Raquel Castillo Solsona; Florenci Vicent González Adelantado; Vicente Moliner Ibáñez. En: Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC-2011).
- 14** **Título del trabajo:** Theoretical view of formate dehydrogenase mutations.
Nombre del congreso: World Association of Theoretical and Computational Chemist (WATOC-2011)
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE



Ciudad de celebración: Santiago de Compostela,

Fecha de celebración: 17/07/2011

Raquel Castillo Solsona; Mónica Oliva Domínguez; Vicente Moliner Ibáñez. En: World Association of Theoretical and Computational Chemist (WATOC-2011).

- 15** **Título del trabajo:** A theoretical study of the hydrolysis of organophosphates by phosphotriesterase
Nombre del congreso: Expanding the frontiers of molecular dynamics simulations in biology
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de celebración: Barcelona,
Fecha de celebración: 23/11/2010
Raquel Castillo Solsona; V. López-Canut; Vicente Moliner Ibáñez; I. Tuñón. En: Expanding the frontiers of molecular dynamics simulations in biology.
- 16** **Título del trabajo:** DFT/MM studies of the cytochrome P450 aromatase inhibition by exemestane, in the treatment of breast cancer
Nombre del congreso: Expanding the frontiers of molecular dynamics simulations in biology
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de celebración: Barcelona,
Fecha de celebración: 23/11/2010
I. Viciano; Raquel Castillo Solsona; Sergio Martí Forés. En: Expanding the frontiers of molecular dynamics simulations in biology.
- 17** **Título del trabajo:** DFT/MM Studies of The Exemestane as an aromatase inhibitor in the treatment of female breast cancer.
Nombre del congreso: International Symposium of Theoretica Biophysics
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Ciudad de celebración: Roscoff, Francia
Fecha de celebración: 29/06/2010
Ignacio Viciano Gonzalo; I. Viciano; Raquel Castillo Solsona; Sergio Martí Forés; Vicente Moliner Ibáñez. En: International Symposium of Theoretica Biophysics.
- 18** **Título del trabajo:** DFT study of Compound I and theoretical study of Two-State Reactivity of Exemestane in the first hydroxylation step of cytochrome P450 Aromatase.
Nombre del congreso: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Ciudad de celebración: Oviedo, España
Fecha de celebración: 29/06/2010
Ignacio Viciano Gonzalo; I. Viciano; Raquel Castillo Solsona; Sergio Martí Forés. En: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications.
- 19** **Título del trabajo:** A theoretical of the Dynamic Effects in Formate Dehydrogenase.
Nombre del congreso: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Ciudad de celebración: Oviedo,
Fecha de celebración: 29/06/2010
Mónica Oliva Domínguez; Raquel Castillo Solsona; M.Roca; Vicente Moliner Ibáñez; I. Tuñón. En: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications.



- 20 Título del trabajo:** Effects of Ionic Media on a Diels-Alder Reaction: A Theoretical QM/MM Study
Nombre del congreso: Theoretical Chemistry: Modeling Reactivity From Gas Phase To Biomolecules and Solids
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Ciudad de celebración: Barcelona,
Fecha de celebración: 29/06/2009
Raquel Castillo Solsona; Mónica Oliva Domínguez; Vicente Sixto Safont Villarreal; Juan Manuel Andrés Bort; R. Contreras. En: Theoretical Chemistry: Modeling Reactivity From Gas Phase To Biomolecules and Solids.
- 21 Título del trabajo:** Dynamic Effects in a hydride transfer reaction catalyzed by Formate Dehydrogenase
Nombre del congreso: Theoretical Chemistry: Modeling Reactivity From Gas Phase To Biomolecules and Solids
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Ciudad de celebración: Barcelona,
Fecha de celebración: 29/06/2009
María Teresa Roca Moliner; Mónica Oliva Domínguez; Raquel Castillo Solsona; Vicente Moliner Ibáñez; Iñaki Tuñón. En: Theoretical Chemistry: Modeling Reactivity From Gas Phase To Biomolecules and Solids.
- 22 Título del trabajo:** A QM/MM study of the rate limiting step in the Formate Dehydrogenase
Nombre del congreso: Isotopes07
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de celebración: Benicàssim (Spain),
Fecha de celebración: 27/05/2007
Raquel Castillo Solsona; Mónica Oliva Domínguez; Sergio Martí Forés; Vicente Moliner Ibáñez. En: Isotopes07.
- 23 Nombre del congreso:** Isotopes07
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Comité organizador
Ciudad de celebración: Benicàssim (Spain),
Fecha de celebración: 27/05/2007
Vicente Moliner Ibáñez; Juan Manuel Andrés Bort; Raquel Castillo Solsona; Sergio Martí Forés. En: Isotopes07.
- 24 Título del trabajo:** Estudio QM/MM de inhibidores de integrase do HIV-1
Nombre del congreso: Chitel 2006
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de celebración: Côtes de Carthage (Tunisia),
Fecha de celebración: 01/09/2006
Cláudio N. Alves; Sergio Martí Forés; Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort; Vicente Moliner Ibáñez; Iñaki Tuñón; Estanislao Silla. En: Chitel 2006.
- 25 Título del trabajo:** Rational design of improved biological catalysts from computational chemistry techniques
Nombre del congreso: ESPA 2006. Electronic Structure: Principles and Applications
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de celebración: Santiago de Compostela (España),



Fecha de celebración: 18/07/2006

Sergio Martí Forés; Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort; Vicente Moliner Ibáñez; E. Silla; I. Tuñón; J. Bertrán. En: ESPA 2006. Electronic Structure: Principles and Applications.

26 Título del trabajo: QM/MM Modelling of the formate ion oxydation to CO₂ by formate dehydrogenase

Nombre del congreso: 2006 ISQBP President's Meeting.

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Ponencia

Ciudad de celebración: Estrasburgo, Francia

Fecha de celebración: 24/06/2006

Mónica Oliva Domínguez; Raquel Castillo Solsona; Sergio Martí Forés; Juan Manuel Andrés Bort; Vicente Moliner Ibáñez. En: 2006 ISQBP President's Meeting..

27 Título del trabajo: A QM/MM study of the protein-ligand interaction energy for inhibitors of HIV-1 IN

Nombre del congreso: MedChem Europe 2006

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Ponencia

Ciudad de celebración: Praga (República Txeca),

Fecha de celebración: 21/02/2006

C. N. Alves; Sergio Martí Forés; Vicente Moliner Ibáñez; Juan Manuel Andrés Bort; Raquel Castillo Solsona; I. Tuñón; E. Silla. En: MedChem Europe 2006.

28 Título del trabajo: A Theoretical Approach to the Study of Chemical Reactions in Biological Catalysis

Nombre del congreso: Isotopes in Biological and Chemical Sciences. GRC

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Ponencia

Ciudad de celebración: Ventura, California, EEUU,

Fecha de celebración: 12/02/2006

Natalia Kanaan Izquierdo; Sergio Martí Forés; María Teresa Roca Moliner; Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort; Vicente Moliner Ibáñez; Silvia Ferrer; Iñaki Tuñón; Estanislao Silla; Juan Bertrán; Ian H. Williams; Amnon Kohen. En: Isotopes in Biological and Chemical Sciences. GRC.

29 Título del trabajo: Effect of fused silica capillary on the chromatographic behaviour of As, Se and Cr speciation by μ HPLC-ICPMS

Nombre del congreso: 11as Jornadas de Análisis Instrumental

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Nacional

Tipo de participación: Ponencia

Ciudad de celebración: Barcelona,

Fecha de celebración: 15/11/2005

Antoni Francesc Roig Navarro; Raquel Castillo Solsona; Félix Javier Hernández Hernández. En: 11as Jornadas de Análisis Instrumental.

30 Título del trabajo: QM/MM Modelling of the methanol oxydation by quinoprotein methanol dehydrogenase

Nombre del congreso: Quantum Atomic & Molecular Tunneling in Solids and Other Condensed Phases

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Ponencia

Ciudad de celebración: Santiago de Compostela,

Fecha de celebración: 27/07/2005

Juan Manuel Andrés Bort; Raquel Castillo Solsona; Mónica Oliva Domínguez; Vicente Moliner Ibáñez. En: Quantum Atomic & Molecular Tunneling in Solids and Other Condensed Phases.



- 31 Título del trabajo:** A QM/MM Study of the rate limiting step in the Formate Dehydrogenase
Nombre del congreso: Computational Chemical Dynamics
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de celebración: Minnesota (Estados Unidos),
Fecha de celebración: 07/10/2004
Mónica Oliva Domínguez; Raquel Castillo Solsona; Sergio Martí Forés; Juan Manuel Andrés Bort; Vicente Moliner Ibáñez. En: Computational Chemical Dynamics.
- 32 Título del trabajo:** Theoretical Insights in Enzyme Catalysis. Towards a rational Design of Catalytic Antibodies
Nombre del congreso: ESPA 2004. Electronic Structure. Principles and Applications
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia invitada
Ciudad de celebración: Valladolid. España,
Fecha de celebración: 15/09/2004
Vicente Moliner Ibáñez; Sergio Martí Forés; María Teresa Roca Moliner; Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort; Silvia Ferrer; Iñaki Tuñón; Estanislao Silla; Juan Beltrán; Ian H. Williams. En: ESPA 2004. Electronic Structure. Principles and Applications.
- 33 Título del trabajo:** A Theoretical Approach to the Study of Enzyme Catalysis. Theory and Applications
Nombre del congreso: m-Theochem. Modelling and Understanding in Theoretical Chemistry
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de celebración: Luca, Italia
Fecha de celebración: 01/08/2004
Vicente Moliner Ibáñez; Sergio Martí Forés; María Teresa Roca Moliner; Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort; Silvia Ferrer; Iñaki Tuñón; Estanislao Silla; Juan Beltrán; Ian H. Williams. En: m-Theochem. Modelling and Understanding in Theoretical Chemistry.
- 34 Título del trabajo:** Theoretical Study of the catalytic mechanism of glycine-N-methyltransferase
Nombre del congreso: 2004 ISQBP President's Meeting
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de celebración: Como (Italia),
Fecha de celebración: 05/06/2004
C. Christov; A. Soriano; Raquel Castillo Solsona; B. Moliner; I. Tuñón; Juan Manuel Andrés Bort. En: 2004 ISQBP President's Meeting.
- 35 Título del trabajo:** QM/MM Modelling of the Rate Limiting Step Catalyzed by Formate Dehydrogenase: the Hydride Transfer
Nombre del congreso: Modeling Chemical Reactivity: From Gas-Phase to Solution and Enzymes.
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de celebración: Nancy, Francia
Fecha de celebración: 16/04/2003
Mónica Oliva Domínguez; Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort; Vicente Moliner Ibáñez. En: Modeling Chemical Reactivity: From Gas-Phase to Solution and Enzymes..

- 36** **Título del trabajo:** A QM/MM Study of the B-Lactamases enzymes
Nombre del congreso: WATOC'02
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de celebración: Lugano, Switzerland,
Fecha de celebración: 04/08/2002
Raquel Castillo Solsona; I. Tuñón; E. Silla. En: WATOC'02.
- 37** **Título del trabajo:** A QM/MM Theoretical Study of Enzyme Reaction Mechanism. An Analysis of the Electrostatic and Mechanical Contributions
Nombre del congreso: Electronic Structure: Prediction and Applications
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de celebración: Donostia,
Fecha de celebración: 04/10/2000
Vicente Moliner Ibáñez; Sergio Martí Forés; Raquel Castillo Solsona; Mónica Oliva Domínguez; Juan Manuel Andrés Bort; I. Tuñón; E. Silla; J. Bertrán; M.J. Field; P. Sherwood; I.H. Williams. En: Electronic Structure: Prediction and Applications.
- 38** **Título del trabajo:** Estudios Teóricos de Reacciones Enzimáticas mediante Técnicas Híbridas QM/MM
Nombre del congreso: XXVI Congresso dos Químicos Teóricos de Expressao Latina
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de celebración: Caxambu, Brasil
Fecha de celebración: 03/09/2000
Vicente Moliner Ibáñez; Sergio Martí Forés; Raquel Castillo Solsona; Mónica Oliva Domínguez; Juan Manuel Andrés Bort; I. Tuñón; E. Silla; J. Bertrán; J. Field; I.H. Williams. En: XXVI Congresso dos Químicos Teóricos de Expressao Latina.
- 39** **Título del trabajo:** QM/MM Modelling of Oxydation of Formate to CO₂ in the Active Site of Formate Dehydrogenase
Nombre del congreso: Computational Biophysics 2000
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Tipo de participación: Ponencia
Ciudad de celebración: Nice,
Fecha de celebración: 13/06/2000
Mónica Oliva Domínguez; Raquel Castillo Solsona; Vicente Sixto Safont Villarreal; Juan Manuel Andrés Bort; Vicente Moliner Ibáñez; P. Sherwood; Ian H. Williams. En: Computational Biophysics 2000.
- 40** **Título del trabajo:** Theoretical Studies on the Gas Phase Decompositions of Several Carboxylic Acid Derivatives.
Nombre del congreso: 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists WATOC99
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE
Ciudad de celebración: Londres,
Fecha de celebración: 01/08/1999
Vicente Sixto Safont Villarreal; Juan Manuel Andrés Bort; Mónica Oliva Domínguez; Raquel Castillo Solsona; Vicente Moliner Ibáñez; L.R. Domingo; G. Chuchani. En: 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists WATOC99.
- 41** **Título del trabajo:** Theoretical Study of Enzyme Reaction Mechanisms by a Hybrid QM/MM Method.
Nombre del congreso: 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists WATOC99
Tipo evento: Congreso **Ámbito geográfico:** Internacional no UE

Ciudad de celebración: Londres,

Fecha de celebración: 01/08/1999

Vicente Moliner Ibáñez; Vicente Sixto Safont Villarreal; Raquel Castillo Solsona; Sergio Martí Forés; Mónica Oliva Domínguez; Juan Manuel Andrés Bort; A. J. Turner; I.A. Williams. En: 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists WATOC99.

- 42 Título del trabajo:** A Theoretical Study Of Favorskii Rearrangement by a Hibrid QM/MM Method in Aqueous Solution.

Nombre del congreso: 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Ciudad de celebración: Londres,

Fecha de celebración: 01/08/1999

Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort; Vicente Moliner Ibáñez. En: 5th World Congress of Theoretically Oriented Chemists.

- 43 Título del trabajo:** Estructura i Reactivitat Química. Efectes del Medi: Dissolvent i Enzims

Nombre del congreso: XV Reunió del Grup de Química Teòrica de Catalunya

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Nacional

Tipo de participación: Ponencia

Ciudad de celebración: Bellaterra, España

Fecha de celebración: 14/06/1999

Juan Manuel Andrés Bort; Armando Beltrán Flors; Rosa María Llusar Barelles; Vicente Sixto Safont Villarreal; Vicente Moliner Ibáñez; Joaquín Jose Queralt Gimeno; Mónica Oliva Domínguez; Raquel Castillo Solsona; Sergio Martí Forés; Mónica Calatayud Antonino. En: XV Reunió del Grup de Química Teòrica de Catalunya.

- 44 Título del trabajo:** Theoretical modelling of reaction mechanisms by a hybrid QM/MM method

Nombre del congreso: Molecular Structure and Dynamics in Biology

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Ponencia

Ciudad de celebración: Elba, Italia

Fecha de celebración: 08/09/1998

Vicente Moliner Ibáñez; Vicente Sixto Safont Villarreal; Raquel Castillo Solsona; Sergio Martí Forés; Mónica Oliva Domínguez; Juan Manuel Andrés Bort. En: Molecular Structure and Dynamics in Biology.

- 45 Título del trabajo:** Molecular mechanisms for the carboxylation and oxygenation sequences catalyzed by Rubisco Enzyme.

Nombre del congreso: Molecular Structure and Dynamics in Biology

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Ciudad de celebración: Elba, Italia

Fecha de celebración: 08/09/1998

Vicente Sixto Safont Villarreal; Vicente Moliner Ibáñez; Mónica Oliva Domínguez; Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort; Orlando Tapia. En: Molecular Structure and Dynamics in Biology.

- 46 Título del trabajo:** Theoretical QM/MM study of enzyme reaction mechanisms

Nombre del congreso: 14 th International Conference on Physical Organic Chemistry. 4th Latin American Conference on Physical Organic Chemistry

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Ponencia

Ciudad de celebración: Florianópolis, Santa Catarina. Brazil,

Fecha de celebración: 16/08/1998



Vicente Moliner Ibáñez; Raquel Castillo Solsona; Sergio Martí Forés; Juan Manuel Andrés Bort. En: 14 th International Conference on Physical Organic Chemistry. 4th Latin American Conference on Physical Organic Chemistry.

- 47 Título del trabajo:** QM/MM Transition Structure Characterization for Enzyme Molecular Mechanisms
Nombre del congreso: European Conference: Computational Chemistry and the Living World. From Sequence to Function

Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Ponencia

Ciudad de celebración: Chambery,

Fecha de celebración: 20/04/1998

Vicente Moliner Ibáñez; Raquel Castillo Solsona; Sergio Martí Forés; Mónica Oliva Domínguez; Vicente Sixto Safont Villarreal; Juan Manuel Andrés Bort; I. Tuñón; E. Silla; I.H. Williams; A.J. Turner; O. Tapia. En: European Conference: Computational Chemistry and the Living World. From Sequence to Function.

- 48 Título del trabajo:** A Hybrid QM/MM Theoretical Study of the Favorskii Rearrangement
Nombre del congreso: Third European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics
Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Ponencia

Ciudad de celebración: Granada,

Fecha de celebración: 19/04/1998

Raquel Castillo Solsona; Sergio Martí Forés; Mónica Oliva Domínguez; Vicente Moliner Ibáñez; Juan Manuel Andrés Bort. En: Third European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics.

- 49 Título del trabajo:** Transition Structure Invariances in Rubisco Catalytic Mechanism: Modelling the Magnesium Coordination Sphere effects on TSs
Nombre del congreso: Third European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics
Tipo evento: Congreso

Ámbito geográfico: Internacional no UE

Tipo de participación: Ponencia

Ciudad de celebración: Granada,

Fecha de celebración: 19/04/1998

Mónica Oliva Domínguez; Vicente Sixto Safont Villarreal; Raquel Castillo Solsona; Juan Manuel Andrés Bort; Orlando Tapia. En: Third European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics.