

Fecha del CVA	25/09/2023
---------------	------------

Parte A. DATOS PERSONALES

Nombre	JUAN		
Apellidos	FRAU MUNAR		
Sexo	Hombre	Fecha de Nacimiento	17/08/1964
DNI/NIE/Pasaporte	43015989D		
URL Web			
Dirección Email	juan.frau@uib.es		
Open Researcher and Contributor ID (ORCID)	0000-0003-2562-9975		

A.1. Situación profesional actual

Puesto	Catedrático de universidad		
Fecha inicio	2011		
Organismo / Institución	Universidad de las Islas Baleares		
Departamento / Centro	Departamento de Química / Facultad de Ciencias		
País	España	Teléfono	971173254 - 3254
Palabras clave			

A.2. Situación profesional anterior (incluye interrupciones en la carrera investigadora - indicar meses totales, según texto convocatoria-)

Periodo	Puesto / Institución / País
2017 - 2021	Vicerrector de Docencia de la UIB / Universidad de las Islas Baleares
2016 - 2017	Director Departamento de Química de la UIB / Universidad de las Islas Baleares
2012 - 2016	Subdirector Departamento de Química de la UIB / Universidad de las Islas Baleares
1997 - 2011	Prof. Titular de Universidad / Universidad de las Islas Baleares
1996 - 1997	Prof. Titular Interino / Universidad de las Islas Baleares
1995 - 1996	Prof. Ayudante de EU / Universidad de las Islas Baleares
1990 - 1995	Prof. Ayudante de Univer. / Universidad de las Islas Baleares
2011 -	Catedrático de Universidad / Universidad de las Islas Baleares

A.3. Formación académica

Grado/Master/Tesis	Universidad / País	Año
Ciencias Químicas	Universidad de las Islas Baleares	1992
Ciencias Químicas	Universidad de las Islas Baleares	1987

Parte B. RESUMEN DEL CV

Curriculum vitae -

Catedrático de Universidad de Química Física en la Universidad de las Islas Baleares desde 2011.

Actividad investigadora. Tras doctorarme en Química por la Universidad de las Islas Baleares (1992), realicé una estancia postdoctoral en la University College London. He publicado más de 150 artículos en revistas internacionales, participado en 150 congresos científicos y en 27 proyectos de investigación obtenidos en convocatorias públicas. Las grandes líneas de investigación asociadas a estos trabajos son el estudio del mecanismo de acción de sistemas beta-lactámicos, el mecanismo de formación de bases de Schiff de derivados de la vitamina B6, el mecanismo de inhibición de la FPPS humana y en los últimos años la glicación no enzimática de proteínas, con atención especial a la alfa-sinucleína, proteína asociada a la enfermedad

del Parkinson. En todos estos trabajos he participado realizando o coordinando los estudios teóricos en los que fundamentalmente se han utilizado cálculos cuánticos y simulaciones de Dinámica Molecular. Por tanto, el instrumento habitual de trabajo son los clústeres de computación.

Director o codirector de seis tesis doctorales, dos tesis de licenciatura y ocho trabajos de fin de máster. Miembro del comité organizador y del comité científico de la sexta edición del VI ESPA (Electronic Structure: Principles and Applications) y coorganizador del congreso Glycoproteins: From structure to disease, celebrados en Palma de Mallorca en 2008 y 2013, respectivamente. Además también he formado parte del comité organizador, del comité ejecutivo o del comité científico de diversos congresos organizados por ANQUE, destacando especialmente la sexta edición del EuCheMS (Sevilla 2016), y del ESPA 2014 (Granada) y ESPA 2018 (Toledo).

A pesar que realizamos una investigación básica tenemos un contrato de investigación con la empresa Sanifit Therapeutics S.A. Actualmente, tenemos formalizado un acuerdo general de servicios derivado de la aplicación de una metodología teórica que hemos desarrollado.

Actividad docente. Desde 1990 he impartido docencia en asignaturas de la licenciatura de Química de tres planes de estudio, en el Grado de Química y en el Grado de Educación Primaria. Desde el curso 1996-97 también he impartido docencia en el Doctorado de Química de la UIB y en el Máster en Ciencia y Tecnología Química de la UIB, con mención de calidad durante los cursos académicos 2004-2012. Además, he impartido docencia durante 6 años en el Doctorado Interuniversitario en Química Teórica y Modelización Computacional y en cuatro ediciones de la Escuela de Química Teórica que se celebra bianualmente en Palma de Mallorca y de la que actualmente soy el director.

He participado en diversos artículos/libros/comunicaciones docentes/divulgativos, destacando un capítulo del libro Química Teórica y Computacional, y dieciseis proyectos de carácter divulgativo o docente.

Experiencia en gestión. Vicerrector de Docencia de la Universidad de las Islas Baleares (2017-21). Director del Departamento de Química (2016-17), subdirector del Departamento de Química (2012-15). Coordinador para las relaciones entre universidad y centros de secundaria (2006-15). Del 2000 al 2002, coordinador de COU de Química y del 2000 al 2013 profesor especialista de Química de las PAU. Director del Máster de Formación del Profesorado (2009-16). Coordinador local del Máster de Química Teórica y Modelización Computacional celebrado en Palma en 2010 y coordinador del Programa de Doctorado de Química Teórica y Modelización Computacional.

Desde el año 2003, Presidente de la Asociación de Químicos de las Islas Baleares y vicedecano del Colegio Oficial de Químicos de las Islas Baleares.

Parte C. LISTADO DE APORTACIONES MÁS RELEVANTES

C.1. Publicaciones más importantes en libros y revistas con “peer review” y conferencias

AC: Autor de correspondencia; (nº x / nº y): posición firma solicitante / total autores. Si aplica, indique el número de citaciones

- 1 **Artículo científico.** Ana Belén Uceda; Juan Frau; Bartolomé Vilanova; Miquel Adrover. (0/4). 2023. Tyrosine Nitroxidation Does Not Affect the Ability of α -Synuclein to Bind Anionic Micelles, but It Diminishes Its Ability to Bind and Assemble Synaptic-like Vesicles. 919088 - Antioxidants. 12-6, pp.1310. ISSN 2076-3921.
- 2 **Artículo científico.** Ana Belén Uceda; Rafael Ramis; Kris Pauwels; M. Adrover; L. Mariño; Juan Frau; Bartolomé Vilanova. (0/4). 2023. Understanding the effect of the membrane-mimetic micelles on the interplay between α -Synuclein and Cu(II)/Cu(I) cations. 900757 - Journal of Inorganic Biochemistry. 247, pp.112344. ISSN 0162-0134.
- 3 **Artículo científico.** Ana Belén Uceda; Juan Frau; Bartolomé Vilanova; Miquel Adrover. (0/4). 2022. On the effect of methionine oxidation on the interplay between α -synuclein and synaptic-like vesicles. 900293 - International Journal of Biological Macromolecules. 229, pp.92-104. ISSN 0141-8130.
- 4 **Artículo científico.** Ana Belén Uceda; Josefa Donoso; Juan Frau; Bartolomé Vilanova; Miquel Adrover. (0/5). 2021. Frataxins emerge as new players of the intracellular antioxidant machinery. 919088 - Antioxidants. 10-2, pp.315. ISSN 2076-3921. <https://doi.org/10.3390/antiox10020315>
- 5 **Artículo científico.** Marino, L.; Ramis, R.; Casanovas, R.; Ortega-Castro, J.; Casanovas, R.; Vilanova, B.; Frau, J.; Adrover, M.(0/8). 2020. Unravelling the effect of N(ϵ)-(carboxyethyl)lysine on the conformation, dynamics and aggregation propensity of α -synuclein. 915573 - Chemical Science. Royal Society of Chemistry. 11, pp.3332-3344. ISSN 2041-6520. <https://doi.org/10.1039/d0sc00906g>
- 6 **Artículo científico.** Flores-Holguin N.; Frau J.; Glossman-Mitnik D.(0/3). 2020. Virtual Screening of Marine Natural Compounds by Means of Chemoinformatics and CDFT-Based Computational Peptidology. 913844 - Marine Drugs. 18, pp.478. ISSN 1660-3397.
- 7 **Artículo científico.** Rafael Ramis; Joaquín Ortega-Castro; Bartolomé Vilanova; Miquel Adrover; Juan Frau. (0/5). 2020. Unraveling the NaCl Concentration Effect on the First Stages of α -Synuclein Aggregation. 910816 - Biomacromolecules. 21, pp.5200-5212. ISSN 1525-7797. <https://doi.org/10.1021/acs.biomac.0c01292>
- 8 **Artículo científico.** Laura Mariño; Rodrigo Casanovas; Rafael Ramis; Bartolomé Vilanova; Joaquín Ortega-Castro; Juan Frau; Miquel Adrover. (0/7). 2019. Does glycation really distort the peptide α -helicity?. 900293 - International Journal of Biological Macromolecules. 129, pp.254-266. ISSN 0141-8130.
- 9 **Artículo científico.** Ramis, R.; Ortega-Castro, J.; Casanovas, R.; Marino, L.; Vilanova, B.; Adrover, M.; Frau, J.(0/7). 2019. A Coarse-Grained Molecular Dynamics Approach to the Study of the Intrinsically Disordered Protein α -Synuclein. 913199 - Journal Of Chemical Information And Modeling. 59, pp.1458-1471. ISSN 1549-9596.
- 10 **Artículo científico.** Ramis, R.; Ortega-Castro, J.; Caballero, C.; Casanovas, R.; Cerrillo, A.; Vilanova, B.; Adrover, M.; Frau, J. (0/8). 2019. How does pyridoxamine inhibit the formation of advanced glycation end products? the role of its primary antioxidant activity. 919088 - Antioxidants. 8, pp.344. ISSN 2076-3921.
- 11 **Artículo científico.** Frau J.; Flores-Holguín N.; Glossman-Mitnik D.(0/3). 2018. Chemical Reactivity properties, pKa values, AGEs inhibitor abilities and bioactivity scores of the mirabamides A-H peptides of marine origin studied by means of conceptual DFT. 913844 - Marine Drugs. 16-302, pp.1-19. ISSN 1660-3397.
- 12 **Artículo científico.** Laura Mariño; Carlos Andrés Maya- Aguirre; Kris Pauwels; Bartolomé Vilanova; Joaquín Ortega-Castro; Juan Frau; Josefa Donodo; Miquel Adrover. (0/8). 2017. Glycation of Lysozyme by Glycolaldehyde Provides New Mechanistic Insights in Diabetes-Related Protein Aggregation. 913322 - Acs Chemical Biology. 12-6, pp.1152-2017. ISSN 1554-8929. <https://doi.org/10.1021/acscchembio.6b01103>
- 13 **Capítulo de libro.** Flores-Holguín, N.; Frau, J.; Glossman-Mitnik, D.(/3). 2021. Conceptual DFT as a Helpful Chemoinformatics Tool for the Study of the Clavanin Family of Antimicrobial Marine Peptides (Chapter 4). Density Functional Theory Calculations. InTechOpen. pp.63-75. ISBN 978-1-8388-1083-2.

14 Capítulo de libro. Flores-Holguín, N.; Frau, J.; Glossman-Mitnik, D.(/ 3). 2020. Chemical Reactivity Properties and Bioactivity Scores of the Angiotensin II Vasoconstrictor Octapeptide (Chapter 5). Cheminformatics and its Applications. InTechOpen. pp.63-75. ISBN 978-1-8388-0068-0.

C.3. Proyectos o líneas de investigación

- 1 Proyecto.** 219566, DFT Conceptual en el Estudio de Nuevos Inhibidores Moleculares de los Productos Finales de la Glicación Avanzada (AGEs). CONACYT. (Centro Investigador en Materiales Avanzados, S.C). 01/01/2015-31/12/2017.
- 2 Proyecto.** CTQ2014-55835-R, Relación entre la Diabetes Mellitus y la enfermedad del Parkinson: Estudio de los mecanismos moleculares que inducen la glicación y agregación de la alfasinucleína. Secretaría de Estado de Investigación, Desarrollo e Innovación, Ministerio de Economía y Competitividad, Gobierno de España.. (Universidad de las Islas Baleares). 01/01/2015-31/12/2017.
- 3 Proyecto.** AAEE49/2015, Formación de productos avanzados de glicación de la a-sinucleína, proteína asociada a la enfermedad del Parkinson: efecto de los cationes metálicos en la agregación. Conselleria d'Innovació, Recerca i Turisme. (Universidad de las Islas Baleares). 01/01/2016-15/09/2016. 10.024 €.
- 4 Contrato.** Tareas de investigación preclínicas centradas en la modelización molecular de diferentes compuestos sobre la superficie de adsorción de la hidroxiapatita. Contrato de Investigación y Desarrollo en Laboratorios Sanifit Therapeutics S.A. y el grupo de investigación REACMOL de la UIB. Laboratoris Sanifit SL. (Universidad de las Islas Baleares). 15/04/2020-01/10/2021. 20.000 €.