



# Curriculum Vitae

## Elena Laura COITIÑO IZAGUIRRE



Actualizado: 15/07/2017

Publicado: 20/07/2017

**Sistema Nacional de Investigadores**  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas  
Categorización actual: Nivel I  
Ingreso al SNI: Activo(01/03/2009)

## Datos generales

### Información de contacto

E-mail: laurac@fcien.edu.uy

Teléfono: 25252186

Dirección: Laboratorio de Química Teórica y Computacional, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, UdelaR. Iguá 4225 eq. Mataojo, Montevideo 11400, Uruguay

URL: [lqtc.fcien.edu.uy](http://lqtc.fcien.edu.uy)

### Institución principal

Lab. de Quím. Teórica y Computacional, Instituto de Quím. Biológica / Facultad de Ciencias - UDeLaR / Universidad de la República / Uruguay

### Dirección institucional

Dirección: Facultad de Ciencias - UDeLaR / Iguá 4225, esq. Mataojo / 11400 / Montevideo / Montevideo / Uruguay

Teléfono: (+5982) 5252186

Fax: 25250749

E-mail/Web: [laurac@fcien.edu.uy](mailto:laurac@fcien.edu.uy) / <http://lqtc.fcien.edu.uy> <http://www.fcien.edu.uy> <http://iqb.fcien.edu.uy>

## Formación

### Formación concluida

#### Formación académica/Titulación

##### Posgrado

1991 - 1994	<p>Doctorado</p> <p>Dottorato di Ricerche in Scienze Chimiche</p> <p>Universita degli Studi - Pisa , Italia</p> <p>Título: Analisi dell'effetto del solvente su processi chimici coinvolgenti le trasformazioni di gruppi aldeidici. Estensioni del modello del continuo polarizzabile (PCM)</p> <p>Tutor/es: Jacopo Tomasi</p> <p>Obtención del título: 1995</p> <p>Becario de: Comunidad Económica Europea</p> <p>Palabras clave: modelado de procesos reactivos en fase condensada; modelo continuo PCM de solvente; aldehidos y oxoaldehidos</p> <p>Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional, Bioinformática Estructural</p>
1988 - 1991	<p>Maestría</p> <p>Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)</p> <p>Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay</p> <p>Título: Estudio Teórico del Efecto del Agua sobre las Reacciones de Condensación Aldólica del Acetaldehído</p> <p>Tutor/es: Oscar N. Ventura</p> <p>Obtención del título: 1991</p> <p>Becario de: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas , Uruguay</p> <p>Palabras clave: modelado mecanismos; métodos cuánticos; catálisis bifuncional por agua</p> <p>Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-</p>

## Grado

1983 - 1985

Grado

Bachiller en Química

Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Título:* No corresponde

*Tutor/es:* No corresponde

*Obtención del título:* 1988

*Palabras clave:* Química fundamental

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Fundamental

## Formación complementaria

### Postdoctorado

1995 - 1997

Minnesota Supercomputer Institute International Scholar - Institute of Technology - Dept. of Chemistry

University of Minnesota , Estados Unidos

*Becario de:* Minnesota Supercomputer Institute, University of Minnesota, Estados Unidos , Estados Unidos

*Palabras clave:* métodos híbridos IMOMO; Teoría Variacional del Estado de Transición; modelado cinética procesos cont. atmosférica

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Fundamental

### Cursos corta duración

2003 - 2003

Motivación en el aula universitaria

Facultad de Ingeniería - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Areas del conocimiento:* Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Modelos pedagógicos, motivación en el aprendizaje

2003 - 2003

Curso de Diseño de Materiales Educativos para entornos virtuales

Comisión Sectorial de Enseñanza - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Areas del conocimiento:* Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Educación a distancia, materiales

2002 - 2002

Evaluación de Aprendizajes

Comisión Sectorial de Enseñanza - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Palabras clave:* Evaluación Aprendizaje (Camiloni)

*Areas del conocimiento:* Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Evaluación del aprendizaje

2001 - 2001

Comunicación en el Aula Universitaria

Comisión Sectorial de Enseñanza - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Areas del conocimiento:* Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / comunicación en la enseñanza y aprendizaje

2001 - 2001

Metodología Pedagógica y Campus Digital para la Educación Semipresencial y a Distancia

Comisión Sectorial de Enseñanza - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Areas del conocimiento:* Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Educación Semipresencial y a distancia

2001 - 2001

Educación a Distancia; Metodología Pedagógica, Medios Técnicos y Tutorías

Comisión Sectorial de Enseñanza - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Areas del conocimiento:* Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Educación a distancia, tutorías

1997 - 1997

Desarrollo de Material multimedia Interactivo de Apoyo a la Docencia

Facultad de Ingeniería - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

*Areas del conocimiento:* Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Informática Educativa

1996 - 1996

Cray T3D Tutorial: Introduction to MPI - Minnesota Supercomputer Institute

Minnesota Supercomputer Institute, University of Minnesota, Estados Unidos , Estados Unidos

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Cálculo Paralelo de alta performance

- 1993 - 1993 Seminario Nazionale di Chimica Fisica 1993 - Metodos Químico Físicos para el estudio de la catálisis  
Universita degli Studi di Torino , Italia  
*Palabras clave:* Catalisis; Métodos teóricos y experimentales  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Catálisis - teoría y experimento  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Catalisis
- 1993 - 1993 Teoría de los Funcionales de la Densidad -Universidad de Pisa, Enrico Clementi - Darío Estrín  
Università degli Studi di Pisa, Pisa , Italia  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica
- 1990 - 1990 Introducción al Sistema Operativo VMS 5.2 - Instituto de Computación - Univ. Autónoma Barcelona  
Universidad Autonoma de Barcelona , España  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Sistemas operativos
- 1989 - 1989 Métodos Teóricos en Química Organometálica- Agustí Lledós  
Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Quím. Organometálica
- 1988 - 1988 VI Escuela Latinoamericana de Química Teórica - Río de Janeiro  
Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas , Brasil  
*Palabras clave:* Química Teórica  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
- 1987 - 1987 Escuela de Verano de Química Teórica - Curso Avanzado de Química Teórica - INIFTA - Universidad de La Plata, Argentina  
Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas , Argentina  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Cálculos Moleculares en Química Teórica
- 1987 - 1987 Escuela de Verano de Química Teórica - Fotoquímica - INIFTA - Universidad de La Plata, Argentina  
Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas , Argentina  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Fotoquímica

## Otras instancias

- 1997 Seminarios  
*Nombre del evento:* Nuevas Técnicas de Enseñanza e Innovación Pedagógica  
*Institución organizadora:* Cátedra UNESCO - AUGM - UDELAR , Uruguay
- 2012 Otros  
*Nombre del evento:* Curso OEA-Intel - Enfoque de Aprendizaje Basado en Proyectos (8 semanas, a distancia)  
*Institución organizadora:* Organización de los Estados Americanos (OEA)-Intel , Estados Unidos  
*Palabras clave:* Aprendizaje por proyectos; Plataformas Moodle  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / TICs en la educación
- 2005 Otros  
*Nombre del evento:* Curso OEA-Cát. UNESCO-FLACSO: Ciencia, Tecnología y Sociedad: aportes desde el enfoque de género (120 hs, a distancia)  
*Institución organizadora:* INEAM-OEA, Cátedra UNESCO Mujer Ciencia y Tecnología-FLACSO , Estados Unidos  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Enfoque CTS y género
- 1988 Otros  
*Nombre del evento:* Pasantía NRC-Canada, entrenamiento en Espectroscopía FT-IR(5 semanas)  
*Institución organizadora:* FTIR Spectroscopy Lab., Division of Chemistry, NRC, Ottawa , Canadá  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Espectroscopía FT-IR

1987

Otros

*Nombre del evento:* Pasantía FCEN-UBA entrenamiento en Espectroscopía RMN(6 semanas)

*Institución organizadora:* Laboratorio de RMN, FCEN, Universidad de Buenos Aires , Argentina

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Espectroscopía RMN

## Construcción institucional

1997-presente: responsable de instalación, sostén y dirección del Laboratorio (LQTC) y área investigación+formación en Química Teórica&Computacional de FCIEN-UdelaR. 1990-1991:Trabajé en instalar Facultad de Ciencias-UdelaR (Comisión creación; Asistente Académico del Decano Wschebor) y sus Institutos de Química (1991-1996) y Química Biológica (1999-pres) siendo Directora del último en 2001-2003/2012-2014/2014-2016. 2006-2008-Presidí Claustro FCIEN-UdelaR 2010-2012-Integré Mesa Directiva Asamblea General Claustro-UdelaR 2011-2013-Representé Orden Docente CSE-Pro-Rectorado Enseñanza-UdelaR 1998-presente: participo en creación estructuras universitarias de cálculo científico(FCIEN-CCIPI, NICCAD-UdelaR-PEDECIBA) y en diseño curricular de grado/posgrado: Lic. Bioquímica (1998-2013); Diploma Especialización en Bioinformática(2006-2010). Organización de congresos científicos y cursos posgrado regionales en Uy (2003,2013,2015, 2016,2017). Directiva SBF.uy (2014-2017).

## Idiomas

Español

Entiende (Muy Bien) / Habla (Muy Bien) / Lee (Muy Bien) / Escribe (Muy Bien)

Francés

Entiende (Regular) / Habla (Regular) / Lee (Bien) / Escribe (Regular)

Inglés

Entiende (Muy Bien) / Habla (Muy Bien) / Lee (Muy Bien) / Escribe (Muy Bien)

Italiano

Entiende (Muy Bien) / Habla (Muy Bien) / Lee (Muy Bien) / Escribe (Muy Bien)

Portugués

Entiende (Bien) / Habla (Regular) / Lee (Bien) / Escribe (Regular)

## Areas de actuación

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional, Bioinformática Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Físicoquímica Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / bioinformática estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente / Meteorología y Ciencias Atmosféricas / Química de la Atmósfera y su contaminación

## Actuación Profesional

### Cargos desempeñados actualmente

*Desde:* 10/1997

Profesor de Química Teórica y Computacional , (Docente Grado 4 Titular, 40 horas semanales / Dedicación total) , Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Desde:* 10/2015

Investigador Primer Nivel Gr.4, área Química , (40 horas semanales / Dedicación total) , Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas , Uruguay

**Universidad de la República , Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay**

### Vínculos con la institución

*10/1997 - Actual, Vínculo: [Profesor de Química Teórica y Computacional, Docente Grado 4 Titular, \(40 horas semanales / Dedicación total\)](#)*

*04/1997 - 10/1997, Vínculo: [Prof. Adj. Química Teórica y Computacional, Docente Grado 3 Interino, \(40 horas semanales\)](#)*

04/1995 - 10/1996, *Vínculo:* Prof. Adjunto de Quím. Teórica&Computacional, Docente Grado 3 Interino, (40 horas semanales / Dedicación total)

05/1993 - 10/1997, *Vínculo:* Asistente Quím. Teórica & Computacional- Apar, Docente Grado 2 Titular, (30 horas semanales)

08/1991 - 07/1993, *Vínculo:* Asistente de Química Teórica y Computacional, Docente Grado 2 Interino, (30 horas semanales)

*12/1990 - 09/1991, Vínculo: Asistente Académico del Decano, Docente Grado 5 Interino, (30 horas semanales)*

*09/2012 - 12/2016, Vínculo: Directora del Instituto de Química Biológica, Docente Grado 4 Titular, (5 horas semanales / Dedicación total)*

03/2001 - 03/2003, *Vínculo:* Directora del Instituto de Química Biológica, Docente Grado 4 Titular, (5 horas semanales / Dedicación total)

## Actividades

04/1997 - Actual

Dirección y Administración , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC)

Directora del LQTC, formación y coordinación de todo su equipo docente

09/2012 - 12/2016

Dirección y Administración , Facultad de Ciencias, UdelaR , Instituto de Química Biológica

Dirección del Instituto, 2 períodos consecutivos (2012-2014 y 2014-presente)

03/2001 - 04/2003

Dirección y Administración , Facultad de Ciencias , Instituto de Química Biológica

Dirección del Instituto

08/2010 - Actual

Líneas de Investigación , Facultad de Ciencias (UdelaR) , Laboratorio de Química Teórica y Computacional, Instituto de Química Biológica

Caracterización del mecanismo y cinética de procesos redox en proteínas , Coordinador o Responsable

03/2010 - Actual

Líneas de Investigación , Facultad de Ciencias & Facultad de Medicina, UDELAR , Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC) & Depto de Bioquímica

Modelado de la Nitración de ácidos grasos y sus interacciones con el medio y proteínas relevantes a nivel fisiológico. , Coordinador o Responsable

03/2002 - Actual

Líneas de Investigación , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC)

Modelado de reacciones de glicación de aminas biológicas de relevancia fisiológica en condiciones normales y patológicas (Alzheimer, Diabetes y Cáncer) y su sinergia con la oxidación , Coordinador o Responsable

03/2001 - Actual

Líneas de Investigación , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC)

Influencia del entorno fisicoquímico sobre la estructura electrónica y reactividad de bases de ADN: hacia el diseño racional de sondas de Ru(II) para diagnóstico y fármacos para quimioterapia altamente selectivos , Coordinador o Responsable

03/1999 - Actual

Líneas de Investigación , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC)

Estudio del Mecanismo de acción del Cisplatino y Proposición de Nuevos Análogos como Agentes Quimioterapéuticos para Cáncer. , Coordinador o Responsable

07/1997 - Actual

Líneas de Investigación , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC)

Modelado de la Estabilidad y Reactividad de cationes radicales distónicos de interés general y biológico (incluye radicales proteicos) , Coordinador o Responsable

09/1995 - 09/1999

Líneas de Investigación , Facultad de Ciencias-UDELAR & Universidad de Minnesota-USA , Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC) & Dept. of Chemistry

Caracterización del mecanismo de procesos relevantes en Química Troposférica y su contaminación , Coordinador o Responsable

09/1990 - 09/1999

Líneas de Investigación , Univesita degli Studi di Pisa , ICQEM - Facolta di Scienze

Modelado de reacciones químicas de aldehídos en fase condensada y extensiones del modelo PCM , Coordinador o Responsable

03/2013 - Actual

Docencia , Grado

Pasantía de profundización electiva en Química Computacional , Responsable , Licenciatura en Bioquímica

05/1998 - Actual

Docencia , Grado

Curso Taller de Química Computacional - Electiva- Módulo I (modelado de procesos químicos reactivos) , Responsable , Licenciatura en Bioquímica

03/1998 - Actual

Docencia , Grado

Fisicoquímica Moderna - Estructura y Propiedades Moleculares (BFQ003) - Teórico+discusiones+tutorías proyecto , Responsable , Licenciatura en Bioquímica

09/2013 - 11/2013

Docencia , Grado

Seminario 959 - Bioinformática de Proteínas - Introducción a la Biología II , Responsable , Licenciatura en Bioquímica

11/2009 - 08/2010

Docencia , Grado

Curso CSE-CSIC - Fomentando la investigación interdisciplinaria en la enseñanza de Cs. de la Vida , Responsable , Licenciatura en Bioquímica

03/2006 - 06/2007

Docencia , Grado

Química General - Teórico Estructura Molecular e interacciones , Invitado , Licenciatura en Bioquímica

08/2000 - 08/2003

Docencia , Grado

Química Analítica - Teóricos tema Métodos Espectrofotométricos de análisis , Invitado , Licenciatura en Bioquímica

03/1997 - 06/2002

Docencia , Grado

Modelos Teórico-Computacionales en Fisicoquímica -Electiva , Responsable , Licenciatura en Bioquímica

07/1999 - 12/1999

Docencia , Grado

Química Analítica - Curso de emergencia 1999 , Organizador/Coordinador , Licenciatura en Bioquímica

05/1995 - 06/1995

Docencia , Grado

Química General - Cinética Química - Teórico+Ejercicios , Responsable , Licenciatura en Ciencias Biológicas

08/1999 - 12/2003

Docencia , Maestría

Química de la Atmósfera y Polución , Responsable , Maestría en Ingeniería Química

02/2003 - 05/2003

Docencia , Maestría

Comjugando métodos teóricos y experimentales para el estudio de la cinética de procesos químicos , Responsable , Posgrado en Química - Maestría y Doctorado

11/2016 - 11/2016

Docencia , Especialización

Computational Thermochemistry & Kinetics , Organizador/Coordinador , Posgrado en Química - Maestría y Doctorado

10/2012 - 05/2016

Docencia , Especialización

Enzimología, Facultad de Ciencias , Invitado , Posgrado en Química - Maestría y Doctorado

02/2014 - 03/2014

Docencia , Especialización

Curso PEDECIBA-Química - Espectroscopía IR de biomoléculas , Invitado , Posgrado en Química - Maestría y Doctorado

12/2011 - 12/2011

Docencia , Especialización

Herramientas Bioinformáticas para el estudio de la estructura de proteínas - , Organizador/Coordinador

08/1997 - 06/1998

Docencia , Especialización

Termodinámica Estadística y aplicaciones a la Cinética Química , Responsable , Maestría en Química, Especialización profesional

11/2016 - 12/2016

Docencia , Doctorado

Predicción y análisis de la estructura e interacciones de Proteínas, en diálogo con la experimentación , Organizador/Coordinador , Posgrado en Química - Maestría y Doctorado

11/2015 - 11/2015

Docencia , Doctorado

VII Poslatam course: Membrane Lipids, Transporters, Channels, and...all that crosstalk , Organizador/Coordinador , Posgrado Latinoamericano en Biofísica (PosLatAm)

11/2011 - 11/2011

Docencia , Doctorado

Tópicos actuales de la Química Bioinorgánica (III)- Teórico sobre modelado computacional de compuestos de coordinación bioactivos , Invitado , Posgrado en Química - Maestría y Doctorado

06/2009 - 03/2010

Docencia , Doctorado

Theoretical/PRACTICAL Course on Molecular Simulation and Design. , Organizador/Coordinador , Posgrado en Química - Maestría y Doctorado

08/2016 - 09/2016

Extensión , Intendencia Municipal de Montevideo - Atrio Central , Feria de divulgación Latitud Ciencias 2016

Stand Temático Dengue: Módulo Las Proteínas del Dengue (responsable Poster, animaciones, explicaciones, coordinación equipo)

05/2016 - 05/2016

Extensión , Semana de la Ciencia y la Tecnología - MEC , Conferencias de divulgación científica - IFD de la Costa y CERP de Florida

Hablemos de plagio académico: ¿qué es, como se detecta y cómo se combate?

05/2016 - 05/2016

Extensión , Facultad de Ciencias , Semana de la Ciencia y la Tecnología - Jornada de Puertas Abiertas

Conferencia: 'Moléculas y Computadoras; una buena pareja en Ciencias' (estudiantes y profesores de 5to Bachillerato, varios liceos)

05/2006 - 05/2016

Extensión , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Actividades de divulgación científica - SEMANACYT - público general, escolar, liceal, UTU, Técnico Superior, Formación Docente

06/2015 - 06/2015

Extensión , Semana de la Ciencia y la Tecnología 2015 - 3 conferencias , Ministerio de Educación y Cultura y Facultad de Ciencias-UdelaR

Conferencias divulgación científica (Moléculas y Computadoras; una buena pareja en Ciencias, 4tos años Liceo N°1 Solymar e ITS-Tecnólogo Químico, Paysandú; Hablemos de Plagio académico: Qué es, cómo y porqué evitarlo, IFD-Salto, Maestros en formación)

05/2015 - 05/2015

Extensión , Facultad de Ciencias, UdelaR , Semana de la Ciencia y la Tecnología 2015-Jornada de Puertas Abiertas

Conferencia divulgación científica-'Luz para sanar: las terapias fotodinámicas' (Maestros)

09/2014 - 09/2014

Extensión , Intendencia Municipal de Montevideo , Feria de divulgación Latitud Ciencias 2014

Conferencia para todo público: Computadoras y Moléculas, una buena pareja en Ciencias

06/2006 - 06/2013

Extensión , Articulación ANEP-UDELAR

Integrante Comités Científicos para evaluar resultados del Programa PISA

11/2007 - 11/2009

Extensión , Articulación ANEP-UDELAR , Trabajo con Inspectoras de Química - CES (Rebollo, Soubirón)  
Comisión Mixta del Área Química

03/2014 - 09/2014

Capacitación/Entrenamientos dictados , Facultad de Ciencias, Udelar , LQTC-IQB  
Pasantías de profundización (10-11 créditos) de 3 estudiantes de Licenciatura en Bioquímica

06/2014 - Actual

Gestión Académica , Facultad de Ciencias, Udelar , Comisión de Grado de la Facultad  
Miembro titular docente, asesor del Consejo en políticas para las carreras de grado

05/2009 - Actual

Gestión Académica , Facultad de Ciencias , Comisión de Informática-Asesora del Consejo-2 sesiones mensuales  
Miembro titular, representando al Instituto de Química Biológica - especial énfasis en temas de Informática y Enseñanza y Cálculo Intensivo

06/2010 - 06/2012

Gestión Académica , Universidad de la República , Asamblea General del Claustro (AGC)  
Miembro titular Mesa Directiva AGC (secretaria docente); Delegada docente titular por Facultad de Ciencias.

03/2008 - 06/2010

Gestión Académica , Asamblea del Claustro de Facultad , Comisión de Enseñanza (Coordinadora)  
Delegada docente titular, Coordinadora de la Comisión (marzo 2008-Julio 2009; mayo-junio 2010)

03/2007 - 06/2010

Gestión Académica , Instituto de Química Biológica , Comisión Directiva  
Delegada docente titular (2007-2009) y suplente (2009-2010)

03/2006 - 03/2008

Gestión Académica , Asamblea del Claustro de Facultad , Presidencia de la Mesa Directiva del órgano  
Presidente de la Mesa del Claustro, delegada docente titular; miembro de comisiones

05/2003 - 05/2004

Gestión Académica , Comisiones Interfacultades , Ciencias-Química // Ciencias-Ingeniería  
Delegada docente en las Comisiones para redefinir los perfiles de egreso de la Lic. en Bioquímica

03/2001 - 04/2003

Gestión Académica , Instituto de Química Biológica , Dirección  
Directora de Instituto

03/2000 - 03/2003

Gestión Académica , Facultad de Ciencias-Facultad de Química , Comisión Académica Interfacultades - Bioquímica-Bioquímico Clínico  
Delegada docente titular, gestión de la articulación entre carreras

03/2000 - 03/2002

Gestión Académica , Asamblea del Claustro , Comisión de Planes de Estudio  
Delegada docente titular, integrante de la Comisión

11/1999 - 03/2001

Gestión Académica , Instituto de Química Biológica , Comisión Directiva  
Delegada docente suplente

11/1998 - 03/2001

Gestión Académica , Consejo de Facultad , Comisión de informática  
Delegada docente titular

03/1998 - 03/2000

Gestión Académica , Asamblea del Claustro , Comisión Posgrados, inserción laboral y relacionamiento con el medio  
Delegada docente titular



06/1997 - 12/1999

Gestión Académica , Comisión Coordinadora Docente , Licenciatura en Bioquímica

Delegada docente

06/1998 - 09/1999

Gestión Académica , Comisión Asesora del área Bioquímica (CABQ) , Ejecución presupuestal

Delegada docente titular, gestión y seguimiento de la ejecución presupuestal

08/1995 - 09/1995

Gestión Académica , Instituto de Química , Comisión Directiva

Delegada docente suplente (se indica sólo el período de actividad)

01/2016 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias, UdelaR , LQTC-IQB

Estudio del equilibrio conformacional fully-folded locally-unfolded y de la función del residuo Glu143 en el mecanismo de PRDX5 , Integrante del Equipo

04/2014 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias, UdelaR , LQTC-IQB

Efectos de la glicación por metilglioxal sobre propiedades de la albúmina humana y su tiol libre , Integrante del Equipo

08/2010 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Núcleo Interdisciplinario de Computación Científica de Alto Desempeño , Integrante del Equipo

06/2004 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Influencia del entorno fisicoquímico sobre la estructura electrónica y reactividad de bases de ADN: hacia el diseño racional de sondas para diagnóstico y fármacos para quimioterapia altamente selectivos de Ru(II)

03/2001 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Caracterización mediante modelado y simulación computacional de los efectos de la glicación sobre péptidos y proteínas de relevancia fisiológica. , Coordinador o Responsable

06/2000 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Enzimología Computacional: ¿Cationes radicales distónicos en la transformación del sustrato del sistema Etanolamina Amonio Liasa/B12? , Coordinador o Responsable

03/1999 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Estudio del mecanismo de acción del Cisplatino y proposición de nuevos análogos como agentes quimioterapéuticos , Coordinador o Responsable

06/2009 - 12/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Fomentando la metacognición y el desarrollo de pensamiento autónomo y crítico desde ambientes de aprendizaje cooperativo/colaborativo en Físicoquímica Moderna , Coordinador o Responsable

06/2009 - 08/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Abordaje de problemas de Ciencias de la Vida desde una perspectiva multidisciplinaria , Integrante del Equipo

05/1995 - 10/1999

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Microsíntesis de reacciones químicas: estudio teórico de la estructura y reactividad de cationes radicales distónicos , Coordinador o Responsable

11/1997 - 11/1998

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Computational Modeling of the Mechanism and Kinetics of Chemical Processes of Atmospheric Interest , Coordinador o Responsable

**Universidad de la República , Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay**

[Vínculos con la institución](#)

06/1995 - 12/1995, *Vínculo:* Profesor Adjunto de Química Cuántica, Docente Grado 3 Interino, (20 horas semanales)

09/1989 - 12/1989, *Vínculo:* Ayudante de Química Cuántica, Docente Grado 1 Interino, (20 horas semanales)

12/1987 - 12/1990, *Vínculo:* Ayudante Honorario de Química Cuántica, Docente Grado 1 Interino, (6 horas semanales)

12/1986 - 12/1987, *Vínculo:* Aspirante a Ayud. Honorario de Quím. Cuántica, Docente Grado 1 Interino, (6 horas semanales)

## Actividades

06/1988 - 06/1991

Líneas de Investigación , Cátedra de Química Cuántica

Caracterización Físicoquímica de Plásticos Polivinílicos Derivados de Aldehídos de Interés Químico y Bioquímico , Integrante del Equipo

05/1995 - 09/1995

Docencia , Especialización

Química Cuántica - Curso introductorio , Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

08/1991 - 09/1991

Docencia , Especialización

Mecánica Cuántica

## Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas , Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas , Uruguay

### Vínculos con la institución

10/2015 - Actual, *Vínculo:* Investigador Primer Nivel Gr.4, área Química, (40 horas semanales / Dedicación total)

09/1988 - 08/1991, *Vínculo:* Becario de posgrado (eq. Gr.2, 30 hs), 1er Ge, (40 horas semanales)

09/1991 - 00/1994, *Vínculo:* Investigador Gr.3 del área Química, (30 horas semanales)

00/1994 - 00/2005, *Vínculo:* Investigador Primer Nivel, Gr.5 área Química, (40 horas semanales / Dedicación total)

### Lineas de investigación

*Título:* Caracterización del mecanismo de procesos relevantes en Química Troposférica y su contaminación

*Tipo de participación:* Coordinador o Responsable

*Objetivo:* Esta línea fue iniciada en el contexto de la etapa post-doctoral desarrollada en el grupo de Don Truhlar en Minneapolis, y fue continuada en el período 1997-1999 al asumir la conducción del LQTC en Montevideo, trabajando con colaboradores de perfil en Ingeniería Química y un estudiante de Maestría con baja dedicación, que terminó abandonando los estudios tras un año de desarrollo sin obtener beca. A partir de 1999 con la integración de la unidad al Instituto de Química Biológica fue necesario dedicar los esfuerzos de generar recursos humanos desde el pre-grado y establecer nuevas líneas de investigación en el área bioquímica/biomédica, integrado el grupo sólo con colaboradores no graduados del área bioquímica no fue posible continuar con su desarrollo

*Equipos:* Laura Coitiño(Integrante); Leonardo Lucchini(Integrante); Leonidas Carrasco(Integrante)

*Palabras clave:* Cinética Química; Mecanismos de procesos troposféricos; Teoría Variacional del Estado de Transición; Modelado cuántico

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente / Meteorología y Ciencias Atmosféricas / Química de la Atmósfera y su contaminación

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

*Título:* Caracterización del mecanismo y cinética de procesos redox en proteínas

*Tipo de participación:* Coordinador o Responsable

*Objetivo:* Estudio del mecanismo de reacciones redox en proteínas. Los primeros antecedentes de este tipo corresponden al estudio de reacciones de oxidación ligadas al mecanismo de acción catalítica de la peroxiredoxina 5 sobre H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, que fuera iniciado como trabajo de tesina de graduación en 2010 y continuado como tesis de posgrado desde 2013, ampliando los estudios a la Prx6. Posteriormente, en 2011 se sumó el estudio de este tipo de procesos sobre el tiol de la albúmina sérica humana, iniciado en el contexto de uno de los posgrados en curso en el LQTC, próximo a concluir en 2016. Estos estudios se realizan como contrapartida de estudio experimentales. También dentro de esta línea se encuadran estudios del mecanismo Redox de enzimas NADH-Fumarato reductasas.

*Equipos:* B. Álvarez(Integrante); G. Ferrer-Sueta(Integrante); S. Portillo(Integrante); J. Bonanata(Integrante); S. Sastre(Integrante)

*Título:* Caracterización Físicoquímica de Plásticos Polivinílicos Derivados de Aldehídos de Interés Químico y Bioquímico

*Tipo de participación:* Integrante del Equipo

*Objetivo:* Modelado de procesos de hidratación de aldehídos simples con métodos cuánticos semiempíricos (en Montevideo) y ab initio (en Barcelona)

*Palabras clave:* modelado de reacciones de aldehídos

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Cuántica, Físicoquímica Orgánica

**Título:** Estudio del Mecanismo de acción del Cisplatino y Proposición de Nuevos Análogos como Agentes Quimioterapéuticos para Cáncer.

**Tipo de participación:** Coordinador o Responsable

**Objetivo:** Esta es la primera línea de investigación especialmente diseñada y montada por quien escribe para el contexto de formación de recursos humanos para la investigación de perfil bioquímico, ante la incorporación del LQTC al Instituto de Química Biológica de la Facultad de Ciencias creado en 1999, dando espacio para el desarrollo de dos tesinas de graduación y una tesis de posgrado a nivel de Maestría y Doctorado. La misma se orientó a modelar los procesos químicos de transformación en el organismo de compuestos de Pt(II/IV)/Pd(II) con acción quimioterapéutica y el screening in silico de potenciales agentes con mejor perfil farmacológico, con especial énfasis puesto hacia el tratamiento del cáncer en interacción con el ADN. A partir de 2010 se ha comenzado a explorar a partir del screening in silico la posible actividad antichagásica de compuestos cuadrado planos, vertiente que se está desarrollando en cooperación con la Dra. Dinorah Gambino de la Facultad de Química de la UdelaR.

**Equipos:** Pablo D. Dans(Integrante); Alicia Merlino(Integrante); Álvaro Pittini(Integrante); Stephanie Portillo(Integrante); Karina Cal(Integrante); Lucía Minini(Integrante)

**Palabras clave:** Anticancerígenos Pt/PD

**Áreas del conocimiento:** Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

**Título:** Influencia del entorno fisicoquímico sobre la estructura electrónica y reactividad de bases de ADN: hacia el diseño racional de sondas de Ru(II) para diagnóstico y fármacos para quimioterapia altamente selectivos

**Tipo de participación:** Coordinador o Responsable

**Objetivo:** Segunda línea diseñada y montada por quien escribe para el LQTC en el contexto del Instituto de Química Biológica y dirigida a la formación de recursos humanos en el área bioquímica. En la misma se desarrolló una tesina de graduación, y numerosas pasantías por proyecto. Contiene dos componentes principales: a) modelado de los efectos del entorno local (secuencia y medio) en la reactividad de nucleobases de ADN. b) caracterización de la estructura y propiedades fotofísicas de compuestos octaédricos de [Ru(II)dppzL2]2+ capaces de actuar como sensores de daño precoz de ADN y sus interacciones con secuencias representativas. Actualmente se coopera con el Prof. A. Romerosa (España) y la Prof. D. Gambino (Facultad de Química) en esta temática. También se cooperó entre 2011 y 2014 con la Prof. G. Cárdenas-Girón. Se ha incorporado también un complemento incorporando el estudio de compuestos de vanadio. En estos momentos se desarrolla una tesis doctoral en el área.

**Equipos:** Alicia Merlino(Integrante); Gustavo Mourglia(Integrante); Matías Machado(Integrante); Leonardo Darré(Integrante); Alexandra Castro(Integrante); G. Arrambide(Integrante)

**Áreas del conocimiento:** Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

**Título:** Modelado de la Estabilidad y Reactividad de cationes radicales distónicos de interés general y biológico (incluye radicales proteicos)

**Tipo de participación:** Coordinador o Responsable

**Objetivo:** Esta línea fue la primera elaborada como investigador independiente, presentada a convocatoria concursable nacional (CSE-UdelaR) que obtuvo apoyo. Inicialmente dirigida a caracterizar cationes radicales distónicos derivados de aldehídos y alcoholes, sentó la bases para su posterior extensión al contexto bioquímico de reacciones en enzimas que involucran la generación de radicales distónicos en sus procesos, en particular centrándose la atención en la Etanolamina Amonio Liasa. La línea dio encuadre al desarrollo de una monografía de graduación en 2002, al trabajo de un Ayudante no graduado en 2004-2007 y de una tesina de graduación en Bioquímica completa en 2010. Dada la falta de recursos humanos preparados en el equipo para afrontarla tuvo períodos de inactividad prolongados (2002-2004 y 2007-2009). El estudiante que desarrolló su tesina en la temática optó por otro tema de tesis para su posgrado en el LQTC, pero continuó trabajando en esta línea. Se espera que pueda darle un cierre en 2017 ya en su etapa post-doctoral. También dentro del capítulo de reacciones radicalarias, se trabajó con procesos de abstracción de hidrógeno iniciados por reacción de radicales hidroxilo con prolina. En este caso el trabajo se encuadró en una tesis doctoral (Signorelli) y se desarrolló entre 2011 y 2015.

**Equipos:** Jenner Bonanata(Integrante); Leonardo Lucchini(Integrante); Santiago Signorelli(Integrante); Matías Machado(Integrante)

**Palabras clave:** Cationes radicales distónicos; Catálisis enzimática; Efectos del entorno proteico; Ab initio-DFT-PCM

**Áreas del conocimiento:** Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Enzimología computacional

**Título:** Modelado de la Nitración de ácidos grasos y sus interacciones con el medio y proteínas relevantes a nivel fisiológico.

**Tipo de participación:** Coordinador o Responsable

**Objetivo:** Esta línea nace como corolario al proyecto CSIC de formento a las capacidades de investigación en estudiantes de grado ('Abordaje multidisciplinario de problemas en Ciencias de la Vida') desarrollado entre 2009 y 2010. La misma fue planteada como colaboración con el grupo experimental del Dr. Homero Rubbo y en este momento aborda la caracterización fisicoquímica del efecto de la nitración sobre la estabilidad, reactividad y capacidad de interactuar no covalentemente de los ácidos grasos oleico, linoleico, linoleico conjugado y araquidónico y la influencia del entorno sobre esas propiedades). Particular énfasis se está poniendo en las interacciones del ácido araquidónico con las proteínas PGHS-1/-2 y en las interacciones de toda la serie con el receptor nuclear PPARγ y pronto se incorporarán interacciones con FABP4 (trabajo en cooperación con la Dra. Ana Ferreira). En estos casos es central la reactividad de estos compuestos con tioles. Se ha desarrollado ya una tesina en el área (2014) y está en curso una segunda (2016).

**Equipos:** Alicia Merlino(Integrante); Stephanie Portillo(Integrante); Homero Rubbo(Integrante); Andrés Trotschansky(Integrante); V. Veroli(Integrante); A. Cantou(Integrante)

**Áreas del conocimiento:** Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica,

## Ácidos Grasos, Nitración

*Título:* Modelado de reacciones de glicación de aminas biológicas de relevancia fisiológica en condiciones normales y patológicas (Alzheimer, Diabetes y Cáncer) y su sinergia con la oxidación

*Tipo de participación:* Coordinador o Responsable

*Objetivo:* Esta línea de investigación es la tercera armada por quien escribe para el contexto bioquímico/biomédico. Está orientada a caracterizar el mecanismo detallado de procesos de glicación de aminas de relevancia fisiológica para identificar blancos para el desarrollo de nuevos fármacos y el impacto de la glicación en las aminas. En su contexto se desarrollaron 4 tesinas de graduación de bioquímica completas (mecanismo básico de aminas con oxoaldehídos como MG; glicación de beta-amiloide, glicación de histona H1 y glicación de HSA) y se inició en 2015 un posgrado, interrumpido en 2016. Otros dos posgrados en curso a nivel doctoral incluyen el estudio de la glicación de proteínas centrales (HSA y Prx6) en sinergia con la oxidación de tioles.

*Equipos:* Vanessa Leone(Integrante); Tamara Meirelles(Integrante); S. Portillo(Integrante); F. Klein(Integrante); J. Bonanata(Integrante); F. Ortiz(Integrante)

*Palabras clave:* Glicación; Mecanismos de reacción y papel del agua; modelado DFT-PCM

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Biológica -Química Teórica y Computacional

*Título:* Modelado de reacciones químicas de aldehídos en fase condensada y extensiones del modelo PCM

*Tipo de participación:* Coordinador o Responsable

*Objetivo:* Tema de trabajo de tesis doctoral. Centrado en reacciones de aldehídos de interés químico y biológico.

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

## Proyectos

2001 - Actual

*Título:* Caracterización mediante modelado y simulación computacional de los efectos de la glicación sobre péptidos y proteínas de relevancia fisiológica. , *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Mediante modelado QM y QM/MM y simulaciones, caracterizamos las propiedades de los aductos de péptidos y proteínas de relevancia en el desarrollo de patologías humanas (cáncer, Alzheimer, aterosclerosis y Diabetes) en busca de identificar nuevos marcadores para su detección precoz y blancos para tratamiento farmacológico. Entre las proteínas ligadas a diabetes

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 2(Pregrado),

*Equipo:* Vanessa Leone(Integrante); Tamara Meirelles(Integrante)

*Financiadores:* Sin financiamiento

*Palabras clave:* Glicación; Albúmina, Hemoglobina, LDL y fosfolípidos; Histonas, ADN; Péptido beta-amiloide, proteína TAU

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

2014 - Actual

*Título:* Efectos de la glicación por metilglioxal sobre propiedades de la albúmina humana y su tiol libre, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Este proyecto corresponde a parte de la tesis de uno de mis estudiantes de doctorado, el Lic. Jenner Bonanata, que dirijo en el LQTC como Directora Académica y de Tesis (esta última parte compartida con la Dra. Beatriz Álvarez, del Lab. Enzimología del IQB. Fue financiado en 2014 por la CSIC-UdeLaR, como proyecto de iniciación a la investigación, Modalidad 1.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 1(Doctorado)

*Equipo:* Jenner Bonanata(Responsable)

*Financiadores:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

*Palabras clave:* Glicación; metilglioxal; albúmina

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de proteínas, QM/MM, dinámica molecular

2000 - Actual

*Título:* Enzimología Computacional: ¿Cationes radicales distónicos en la transformación del sustrato del sistema Etanolamina Amonio Liasa/B12?, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Investigación sobre el mecanismo y cinética de los procesos de transformación de etanolamina catalizados por etanolamina amonio-liasa, uno de los mecanismos principales de obtención de C/N y energía por parte de microorganismos entéricos patógenos.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 2(Pregrado), 1(Maestría/Magister),

*Equipo:* Jenner Bonanata(Integrante)

*Financiadores:* Sin financiamiento

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

2016 - Actual

*Título:* Estudio del equilibrio conformacional fully-folded locally-unfolded y de la función del residuo Glu143 en el mecanismo de PRDX5, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Se trata de un proyecto de investigación de iniciación de una de mis estudiantes de doctorado y ayudante en el LQTC, la Lic. Stephanie Portillo, que abarca parte de los temas de su tesis, desarrollada bajo mi dirección académica y de tesis (esto último junto al Prof. G- Ferrer-Sueta) Actúo como tutora del proyecto, financiado por CSIC en el llamado 2015 de proyectos de Iniciación a la Investigación. Modalidad I.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 1(Doctorado)

*Equipo:* Stephanie Portillo(Responsable); Gerardo Ferrer-Sueta(Integrante)

*Financiadores:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

*Palabras clave:* cambio conformacional; Peroxiredoxina 5 ; mecanismo molecular del ciclo catalítico

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de proteínas, QM/MM, dinámica molecular

1999 - Actual

*Título:* Estudio del mecanismo de acción del Cisplatino y proposición de nuevos análogos como agentes quimioterapéuticos, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* En este proyecto, presentado ante la convocatoria CSIC I+D de 1999, estudiamos los procesos que experimenta el Cisplatino (acuación y platinación de ADN) una vez que ingresa al organismo y que explican su eficacia y la aparición de resistencia y efectos colaterales, en busca de proponer alternativas más eficaces. Este proyecto fue el primero desarrollado para el contexto del Instituto de Química Biológica y estudiantes de Bioquímica, permitiendo hasta el momento que en su encuadre se desarrollaran Tesinas de graduación, proyectos de iniciación a la investigación, pasantías de investigación y tesis de posgrado. No obstante carecer actualmente de financiación específica, el proyecto continúa en marcha y sigue dando el espacio para proponer nuevas investigaciones, como la caracterización de compuestos de Pt(IV) que estamos actualmente desarrollando.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 2(Pregrado), 1(Maestría/Magister), 1(Doctorado)

*Equipo:* Pablo D. Dans(Integrante); Alicia Merlino(Integrante); Laura Coitiño(Responsable); Álvaro Pittini(Integrante); Leticia Couto(Integrante)

*Financiadores:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

*Palabras clave:* Anticancerígenos de Pt/Pd; Mecanismo de acción a nivel molecular

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

2004 - Actual

*Título:* Influencia del entorno fisicoquímico sobre la estructura electrónica y reactividad de bases de ADN: hacia el diseño racional de sondas para diagnóstico y fármacos para quimioterapia altamente selectivos de Ru(II), *Descripción:* Este proyecto tiene tres componentes. La primera se orientó a estudiar detalladamente las propiedades químicas y fotofísicas de una serie de compuestos de fórmula general  $[Ru(II)(dppz)_2L]^{2+}$  que poseen la característica de actuar como switches moleculares de luz (emiten en condiciones selectivas a sus interacciones) y pueden ser usados como sensores para daño de ADN. Esto se encara con técnicas DFT, PCM y TD-DFT. La segunda parte se orienta a determinar un conjunto de estructuras de ADN en condiciones fisiológicas, analizando la reactividad de las nucleobases, y la introducción de modificaciones oxidativas. Finalmetne estudiamos las interacciones entre los switches moleculares y estas estructuras de ADN Estas dos últimas líneas se desarrollan combinando estrategias QM y QM/MM con simulaciones de dinámica molecular.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 5(Pregrado), 1(Doctorado)

*Equipo:* Pablo D. Dans(Integrante); Alicia Merlino(Integrante); Gustavo Mourglia(Integrante); Elena Laura Coitiño(Responsable); Matías Machado(Integrante); Leonardo Darré(Integrante); Alexandra Castro(Integrante)

*Financiadores:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

*Palabras clave:* Sensores de Ru(II)dppzL2; plantillas de ADN - Dinámica Molecular

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

2010 - Actual

*Título:* Núcleo Interdisciplinario de Computación Científica de Alto Desempeño, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Integración del LQTC al Núcleo de Investigación y Formación recientemente creado a iniciativa de Facultad de Ingeniería, UdeLaR. Gridificación de paquetes de Química Computacional

*Tipo:* Desarrollo

*Alumnos:*

*Equipo:* Sergio Neschmanow(Responsable)

*Financiadores:* Sin financiamiento / Otra

*Palabras clave:* Computación científica ; Cálculo complejo; alta performance

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos  
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Cálculo científico de alto desempeño

1997 - 1998

*Título:* Computational Modeling of the Mechanism and Kinetics of Chemical Processes of Atmospheric Interest, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Proyecto sobre modelado de mecanismo y cinética de reacciones de interés atmosférico. Se formó a nivel de grado y posgrado y se cooperó con dos grupos españoles y uno brasileño

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 1(Pregrado), 1(Maestría/Magister),

*Equipo:* Angels González-Lafont(Integrante); Jose Corchado(Integrante); Jose Maria Lluch(Integrante)

*Financiadores:* Institución del exterior / Academia del Tercer Mundo - TWAS Research Grants in Basic Sciences / Apoyo financiero

*Palabras clave:* Química Atmosférica; Contaminación Troposférica; Cinética VTST con efecto túnel; Modelado computacional de reacciones

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Cinética

1995 - 1999

*Título:* Microsíntesis de reacciones químicas: estudio teórico de la estructura y reactividad de cationes radicales distónicos, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Modelado de la estructura y reactividad de cationes radicales de complejos de enlace de hidrógeno.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 2(Pregrado),

*Equipo:* Leonardo Lucchini(Integrante); Miquel Solá(Integrante); Miquel Durán(Integrante); Oscar Ventura(Integrante)

*Financiadores:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

*Palabras clave:* Cationes radicales distónicos; MP2 - DFT

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

2009 - 2010

*Título:* Abordaje de problemas de Ciencias de la Vida desde una perspectiva multidisciplinaria, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Este proyecto integra en una única propuesta de trabajo a químicos, bioquímicos y biólogos quienes ya han realizado propuestas educativas tendientes a fortalecer las capacidades de investigación de los estudiantes de grado. Por tal motivo, la consecución de esta propuesta permitirá consolidar acciones ya realizadas y profundizarlas mediante la implementación de una nueva aproximación de carácter multidisciplinario.

*Tipo:* Desarrollo

*Alumnos:* 3(Pregrado),

*Equipo:* Stephanie Portillo(Integrante); Ali Saadoun(Responsable); Mercedes González(Integrante); Ma. Virginia López(Integrante)

*Financiadores:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

*Palabras clave:* desarrollo de capacidades de investigación; aproximación multidisciplinaria; Ácidos grasos omega 3 y omega 6

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Otros Tópicos Biológicos / Fisiología, Nutrición, Patologías

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis y caracterización

espectroscópica

2009 - 2010

*Título:* Fomentando la metacognición y el desarrollo de pensamiento autónomo y crítico desde ambientes de aprendizaje cooperativo/colaborativo en Físicoquímica Moderna, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* La asignatura Físicoquímica Moderna de la Licenciatura en Bioquímica (ex-Físicoquímica II-EPM) constituye un espacio de la educación superior desde donde el equipo docente del Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC) de Facultad de Ciencias lleva adelante desde hace 10 años un trabajo sistemático y sostenido de búsqueda, implantación, análisis y perfeccionamiento permanente de estrategias de enseñanza innovadoras para su contexto, orientadas a mejorar la calidad de los aprendizajes logrados, tanto en el ámbito de lo estrictamente disciplinar, como en lo relativo al desarrollo de competencias generales, igualmente indispensables para preparar profesionales de la ciencia/tecnología autónomos, críticos, flexibles, capaces de comunicar y adaptarse a los cambios de su medio y de los conocimientos. Resultado de esta labor, fuertemente apoyada en una óptica de personalización de la enseñanza en ambientes de aprendizaje cooperativo/colaborativo, que incorpora un sistema de seguimiento, sostén y evaluación continua formativa por múltiples vías (fichas estudiantiles, discusiones orales, construcción de mapas conceptuales, portafolios, trabajos escritos, foros electrónicos, desarrollo de un proyecto integrador que exige elegir y diseñar estrategias fundamentadas para atacar un problema real abierto, planificando y dando forma a la propuesta de un procedimiento para su ejecución) se ha logrado que la asignatura sea una oferta universitaria sólida e integrada en lo disciplinar, con índices de aprobación elevadísimos (>90%), rendimientos académicos promediando el rango "muy bueno" y deserción marginal. Así el primer objetivo de este proyecto es formalizar esta exitosa labor de investigación y práctica educativa, procesando rigurosamente -con el soporte de expertos en educación- la abundante información recabada en estos años, para elaborar un estudio longitudinal del caso, que pueda ser comunicado y difundido en forma amplia, en tanto sus características hacen viable la transferencia de la experiencia a otros ambientes de aprendizaje, en los que puede tener un impacto significativo sobre la calidad de los procesos allí desarrollados. El grupo de actividades asociadas a esta componente del proyecto se planifica para ser desarrollado en los meses 3-12 del proyecto (setiembre 2008-junio 2009). El segundo objetivo que constituye otra línea a desarrollar en este proyecto, se orienta al análisis, mejora y establecimiento de estrategias didácticas innovadoras, incorporadas más recientemente a nuestra configuración



didáctica con el fin de incentivar el desarrollo de competencias generales superiores (habilidades metacognitivas, flexibilidad, autonomía y criterio propio, ejercitación y calibración de la capacidad de evaluar, autoevaluar y coevaluar entre pares en ambientes cooperativos/colaborativos, en los que se intenta elucidar estrategias eficaces para favorecer la instalación de dinámicas intersubjetivas efectivas e integradoras, y el uso participativo de foros electrónicos como herramienta para ensayar y desarrollar aptitudes de argumentación y manejo de la controversia académica). El período previsto para desarrollar las actividades de esta línea, generando materiales y procesando los resultados se extiende desde julio 2008 hasta marzo 2009 (meses 1-9 del proyecto).

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 3(Pregrado),

*Equipo:* Alicia Merlino(Integrante); Álvaro Pittini(Integrante); Jenner Bonanata(Integrante); Stephanie Portillo(Integrante); Marina M. Miguez(Integrante); Ada Czergonowora(Integrante)

*Financiadores:* Otra institución nacional / Comisión Sectorial de Enseñanza, Universidad de la República / Apoyo financiero

*Palabras clave:* Investigación Educativa; Desarrollo metacognición y pensamiento autónomo; Enseñanza y evaluación con mapas conceptuales; evaluación, autoeval. y matrices de valoración

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Educación Universitaria - Didáctica y evaluación

## Producción científica/tecnológica

Inicialmente determiné mecanismos de reacción de aldehídos catalizados por solvente (agua bifuncional), elucidando el papel de redes de enlace de hidrógeno (EdH) moduladoras de la reactividad y caracterizé radicales distónicos por EdH de relevancia biológica y atmosférica. Contribuí validando métodos semiempíricos para describir EdH y extender modelos del entorno MST-PCM para reacciones en solución y sistemas complejos. Posteriormente produje/validé modelos QM:QM(IMOMO) para evaluar energías de reacción y modelos de cinética IVTST-M con efecto túnel, generando herramientas computacionales (Polyrate/Gaussrate) de altísimo impacto mundial y caracterizando reacciones de contaminación troposférica (logramos explicar distribuciones isotópicas de hidrocarburos para NASA). Con apoyo TWAS+CSIC formé mi grupo en Uruguay en 1997, sentando bases para investigar y formar RRHH en Química Atmosférica. Escribí un libro inédito e impartí el 1er curso de Química Atmosférica & Polución del país, siendo pionera en FCIEN-UdelaR en educar a distancia desde 2003 en esta área y en Bioinformática Estructural. En 1999 recibí el Premio CONICYT-TWAS-Jóvenes-investigadores y la unidad académica que monté y lidero (LQTC-FCIEN) se integró al Instituto de Química Biológica (IQB), estructura que ayudé a fundar, siendo su Directora en 2001-2003; 2012-2014; 2014-2016. Esto implicó desplazar mis temas de investigación hacia modelar estructura y reactividad en sistemas complejos de interés bioquímico/biomédico y montar infraestructura de cálculo científico junto a un programa de formación en modelado computacional para Bioquímicos que integró la Bioinformática Estructural, aportando al diseño curricular de grado y posgrado en ambas áreas en UdelaR. Hasta 2009 (1er Maestría+Doctorado orientado en Bioquímica computacional concluyó dic. 2008) fui única responsable de formar >20 jóvenes del pregrado al posgrado en esta nueva área (y crear capacidad local sólida insumió mi mayor esfuerzo esa década) mientras senté bases para modelar procesos químicos e interacciones moleculares relevantes a 3 patologías humanas de alto impacto en Uruguay (Cáncer, Alzheimer y Diabetes) en la bisagra del estrés carbonílico con el oxidativo y también para aportar al diseño racional de moléculas bioactivas para diagnóstico/tratamiento-farmacológico, particularmente agentes de Pt/Pd/Ru con blanco en ADN. Buscamos patrones para proponer/optimizar agentes quimioterapéuticos caracterizando su biotransformación e interacciones con ADN/proteínas y mejoramos la comprensión de su reactividad y modulación del entorno por EdH, área luego extendida a compuestos de vanadio (codirijo otro doctorado desde 2015). En 2009-2010 debí refundar mi grupo (todo el personal que formé para el LQTC-FCIEN fue contratado en conjunto para un nuevo Laboratorio en el IPMON) tomando la oportunidad para pasar el acento al modelado de proteínas, iniciando cooperación con grupos experimentales nacionales, argentinos, español y polaco y grupos teóricos de Argentina, Chile, Brasil, España, Portugal y USA. Desde entonces mi contribución central viene siendo predecir/explicar in silico estructuras proteicas de relevancia fisiopatológica y su modificación, elucidando reactividad, modulación por entornos locales y solvente y mecanismos detallados de reacciones redox (tiol en albúmina, peroxiredoxinas, caspasa-3; fumarato en NADH-Fumarato Reductasas), radicalarias (Etanolamina Amonio Liasa; prolina) y de glicación por azúcares/oxoaldehídos de péptidos/proteínas (b-amiloide/insulina; Albúmina; Histona H1; Peroxiredoxina VI) o su interacción con lípidos y nitroderivados (PPARg; HAMLET; SF1; PGHS-1/2). Los últimos 5 años intensificamos las tesis de grado/posgrado en el área, consolidando producción nacional muy apreciada a nivel internacional (índice h global 24; conferencista invitada USA, Latinoamérica, Europa y Asia; revisora y editora).

## Producción bibliográfica

## Artículos publicados

### Arbitrados

Completo

L. TURELL; D. VITTURI; E. Laura Coitiño; L. LEBRATO; M. MÖLLER; C. SAGASTI; SONIA R. SALVATORE; STEVEN R. WOODCOCK; B. ÁLVAREZ; F. SCHOPFER

The Chemical Basis of Thiol Addition to Nitro-Conjugated Linoleic Acid, a Protective Cell-Signaling Lipid. *Journal of Biological Chemistry*, v.: 292 4, p.: 1145 - 1159, 2017

*Palabras clave:* nitrolinoleic acid; thio-Michael addition; reaction mechanism

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Mecanismos de reacción por modelado computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00219258 ; DOI: 10.1074/jbc.M116.756288

<http://www.jbc.org/content/early/2016/12/06/jbc.M116.756288.abstract>

Enviado el /09/16; Aceptado en forma final el 06/12/16. Publicado: 27/01/17 Seleccionado como Paper of the Week



SCOPUS



Completo

J. BONANATA; L. TURELL; L. ANTMANN; G. FERRER-SUETA; S. BOTASINI; E. MÉNDEZ; B. ÁLVAREZ; E. Laura Coitiño

The thiol of human serum albumin: acidity, microenvironment and mechanistic insights on its oxidation to sulfenic acid. *Free Radical Biology and Medicine*, v.: 108, p.: 952 - 962, 2017

*Palabras clave:* Albumin thiol pKa; HSA Cys34 reactivity ; HSA oxidation by H2O2

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado de pKa de residuos proteicos por cpH-MD

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / pKa de residuos proteicos por modelado y experimento

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Elsevier B. V. ; ISSN: 08915849 ; DOI: 10.1016/j.freeradbiomed.2017.04.021

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0891584917302241>



SCOPUS



Completo

SIGNORELLI, S.; PABLO D. DANS; E. Laura Coitiño; O. BORSANI; J. MONZA

Connecting proline and  $\gamma$ -aminobutyric acid in stressed plants through non-enzymatic reactions. *PLoS ONE*, v.: 10 3, 2015

*Palabras clave:* Mecanismos de reacción; Modelado DFT/PCM

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Cinética Química

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* USA ; ISSN: 19326203 ; DOI: 10.1371/journal.pone.0115349

<http://journals.plos.org/plosone/article?id=10.1371/journal.pone.0115349>



SCOPUS



Completo

G. SCALESE; J. BENÍTEZ; S. ROSTAN; I. CORREIA; L. BRADFORD; M. VIEITES; L. MININI; A. MERLINO; E. Laura Coitiño; E. BIRRIEL; J. VARELA; H. CERECETTO; M. GONZÁLEZ; COSTA PESSOA, J.; D. GAMBINO

Expanding the family of heteroleptic oxidovanadium(IV) compounds with salicylaldehyde semicarbazones and polypyridyl ligands showing anti-Trypanosoma cruzi activity.. *Journal of Inorganic Biochemistry*, v.: 147, p.: 116 - 125, 2015

*Palabras clave:* oxidovanadium bioactive compounds; DNA-ligand docking; DFT structure

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Computacional, Bioquímica Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 01620134 ; DOI: 10.1016/j.jinorgbio.2015.03.002

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0162013415000665>



SCOPUS





Completo

E. RODRÍGUEZ ARCE; F. MOSQUILLO; L. PÉREZ-DÍAZ; G. ECHEVERRÍA; O.E. PIRO; A. MERLINO; E. Laura Coitiño; C. MARÍNGOLO RIBERO; C. Q. F. LEITE; F. R. PAVAN; L. OTERO; D. GAMBINO  
Aromatic amine N-oxide organometallic compounds: searching for prospective agents against infectious diseases. Dalton Transactions, v.: 44, p.: 14453 - 14464, 2015

*Palabras clave:* bioactive Pt/Pd species; DFT characterization; synthesis and physicochemical characterization; biological anti-T.cruzi activity

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Inorgánica

Medicinal

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* UK ; *ISSN:* 14779226 ; *DOI:* 10.1039/c5dt00557d

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/dt/c5dt00557d#ldivAbstract>



SCOPUS



Completo

E. CUEVASANTA; M. LANGE; J. BONANATA; E. Laura Coitiño; G. FERRER-SUETA; M. FILIPOVIC; B. ÁLVAREZ  
Reaction of hydrogen sulfide with disulfide and sulfenic acid to form the strongly nucleophilic disulfide. Journal of Biological Chemistry, v.: 290, p.: 26866 - 26880, 2015

*Palabras clave:* Enzimología; RSSH + HS

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioquímica Computacional, Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* USA ; *ISSN:* 00219258 ; *DOI:* 10.1074/jbc.M115.672816

<http://www.jbc.org/content/290/45/26866>

Seleccionado Paper of the Week por la revista.



SCOPUS



Completo

PEREZ-GARRIDO, N.; SARACO, N.; MARINO, R.; RAMIREZ, P.; CIACCIO, M.; CONSTANZO, M.; WARMAN, D.; MININI, L.; PORTILLO-LEDESMA, S.; RIVAROLA, MA; E. Laura Coitiño; BELGOROSKY, A.  
Functional Characterization of Two Mutations Located in the Ligand Binding Domain in the SF1. International Journal of Endocrinology and Metabolic Disorders, v.: 1 4, p.: 1 - 8, 2015

*Palabras clave:* SF-1 Nuclear Receptor; LBD mutations; Protein-Lipid interactions

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica Computacional

Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Clínica / Endocrinología y Metabolismo / Endocrinología

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* USA ; *ISSN:* 2380548X ; *DOI:* 10.16966/2380-548X.117

<https://www.sciforschenonline.org/journals/endocrinology/article-data/IJEMD-1-117/IJEMD-1-117.pdf>



Completo

SIGNORELLI, S.; E. Laura Coitiño; O. BORSANI; J. MONZA  
Molecular Mechanisms for the Reaction Between •OH Radicals and Proline: Insights on the Role as ROS Scavenger in Plant Stress. Journal of Physical Chemistry B, v.: 118 1, p.: 37 - 47, 2014

*Palabras clave:* DFT-PCM mechanism modeling; Proline as OHscavenger; Proline accumulation in plant stress

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de enzimas y su mecanismo

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Ciencias de las Plantas, Botánica / Stress en plantas y acumulación de prolina

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 10895647 ; *DOI:* 10.1021/jp407773u

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp407773u>

Trabajo aceptado en forma final el 14/12/2013. Publication Date (Web): December 14, 2013



Completo

A. MERLINO; M. VIEITES; D. GAMBINO; E. Laura Coitiño

Homology Modeling of T. cruzi and L. major NADH-dependent Fumarate Reductases: Ligand Docking, Molecular Dynamics Validation and Insights into their Binding Modes. Journal of molecular graphics & modelling, v.: 48, p.: 47 - 59, 2014

*Palabras clave:* Parasitic Fumarate reductases; Structure of the active site

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 10933263

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/10933263>

Trabajo aceptado en diciembre 2013, JMGM-D-13-00026R3



SCOPUS

Completo

E. Laura Coitiño; A. MELLA; CÁRDENAS-JIRÓN

Theoretical Assessment of the Photosensitization Mechanisms of Porphyrin-Ruthenium(II) Complexes for the Formation of Reactive Oxygen Species. Journal of Photochemistry and Photobiology A-Chemistry, v.: 294, p.: 68 - 74, 2014

*Palabras clave:* photosensitization mechanisms; porphyrin-Ru(II)-polypyridyl complexes

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Fotoquímica, Química Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Elsevier, ; ISSN: 10106030 ; DOI: 10.1016/j.jphotochem.2014.08.003

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/aip/10106030>

Enviado: 14/03/14 - Aceptado en forma final: 07/08/14 Publicación de PDF completo en la Web 19/07/2014, como Article in press



SCOPUS



Completo

STEPHANIE PORTILLO; F. SARDI; B. MANTA; M.V. TOURN; A. CLIPPE; B. KNOOPS; B. ÁLVAREZ; E. Laura Coitiño; G. FERRER-SUETA

Deconstructing the catalytic efficiency of peroxiredoxin-5 peroxidatic cysteine. Biochemistry, v.: 53 38, p.: 6113 - 6125, 2014

*Palabras clave:* Peroxiredoxin V; Catalytic mechanism

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica, Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* USA ; ISSN: 00062960 ; DOI: 10.1021/bi500389m

<http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/bi500389m>



SCOPUS



Completo

A. MERLINO; L. OTERO; D. GAMBINO; E. Laura Coitiño

In search of patterns over physicochemical properties and pharmacological activities for a set of [MCl<sub>2</sub>(thiosemicarbazone)] complexes (M = Pt/Pd): Support for multiple mechanisms of antichagasic action excluding DNA-bonding in vivo?. European Journal of Medicinal Chemistry (electrónico), v.: 46 7, p.: 2639 - 2651, 2011

*Palabras clave:* Compuestos de Pt/Pd

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado de estructura y actividad

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 17683254 ; DOI: 10.1016/j.ejmech.2011.03.046

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0223523411002637>



Completo

SIGNORELLI, S.; MÖLLER, M.; E. Laura Coitiño; DENICOLA, A.

Nitrogen Dioxide Solubility and Permeation in Lipid Membranes. Archives of Biochemistry and Biophysics, v.: 512 2, p.: 190 - 196, 2011

*Palabras clave:* Solubilidad de gases en agua y octanol; PERmeabilidad de membranas lipidicas a NO<sub>2</sub>; Modelado DFT/PCM

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional y Físicoquímica Biológica

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Elsevier, Netherlands ; *ISSN:* 00039861 ; *DOI:* 10.1016/j.abb.2011.06.003

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003986111002141>



SCOPUS



Completo

J. BONANATA; SIGNORELLI, S.; E. Laura Coitiño

Increasing Complexity Models for Describing the Generation of Substrate Radicals at the Active Site of Ethanolamine Ammonia-Lyase/B12. Computational and Theoretical Chemistry, v.: 975, p.: 52 - 60, 2011

*Palabras clave:* Etanolamina Amonio Liasa-B12; reaction mechanism; Catálisis enzimática; radicales distónicos; efectos del entorno (DFT/PCM)

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Enzimología

computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* 10.1016/j.comptc.2011.07.029 ; *ISSN:* 2210271X ; *DOI:*

10.1016/j.comptc.2011.07.029

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X11004038>



SCOPUS



Completo

PABLO D. DANS; E. Laura Coitiño

Density Functional Theory Characterization and Descriptive Analysis of Cisplatin Related Compounds. Journal of Chemical Information and Modeling, v.: 49 6, p.: 1407 - 1419, 2009

*Palabras clave:* Anticancer "Pt/Pd ; DFT - PCM; Datamining - Clustering & PCA

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* USA ; *ISSN:* 15499596 ; *DOI:* 10.1021/ci800421w

<http://pubs.acs.org/journal/jcisd8>



SCOPUS



Completo

PABLO D. DANS; ALEJANDRO CRESPO; DARÍO A. ESTRÍN; E. Laura Coitiño

Structural and Energetic Study of Cisplatin and Derivatives: Comparison of the Performance of Density Funtional Theory Implementations. Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 4 5, p.: 740 - 750, 2008

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* ACS,USA ; *ISSN:* 15499618

<http://pubs.acs.org/cgi-bin/abstract.cgi/jctcce/2008/4/i05/abs/ct7002385.html>



SCOPUS

Completo

YAO-YUAN CHUANG; E. Laura Coitiño; DONALD G. TRUHLAR

How should we calculate Transition State Geometries for Radical Reactions? The Effect of Spin Contamination on the Prediction of Geometries for Open-Shell Saddle Points.. Journal of Physical Chemistry A, v.: 104 3, p.: 446 - 450, 2000

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 10895639

<http://pubs.acs.org/cgi-bin/abstract.cgi/jpcfah/2000/104/i03/abs/jp993661v.html>



SCOPUS

Completo

DONALD G. TRUHLAR; Y.-Y. CHUANG; E. Laura Coitiño; JOSÉ C. CORCHADO; CHRISTOPHER J. CRAMER

Thermochemistry, solvation, and dynamics. ACS Division of Fuel Chemistry, Preprints, v.: 44 3, p.: 452 - 458, 1999

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

Medio de divulgación: Papel ; Lugar de publicación: USA ; ISSN: 05693772

Lista completa de autores: Donald G. Truhlar, Yao-Yuan (John) Chuang, E. Laura Coitiño, José C. Corchado, Christopher J. Cramer, Derek Dolney, Joachin Espinosa-Garcia, Patton L. Fast, Gregory D. Hawkins, Yongho Kim, Jiabo Li, Benjamin Lynch, Mala L. Radhakrishnan, Orlando Roberto-Neto, Jocelyn M. Rodgers, Maria Luz Sinchez, Jordi Villi, Paul Winget, and Tianhai (Tony) Zhu,

**SCOPUS**

Completo

JOSÉ C. CORCHADO; E. Laura Coitiño; YAO-YUAN CHUANG; PATTON L. FAST; DONALD G. TRUHLAR

Interpolated Variational Transition-State Theory by Mapping. Journal of Physical Chemistry A, v.: 102, p.: 2424 - 2438, 1998

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel ; Lugar de publicación: ACS, USA ; ISSN: 10895639

<http://pubs.acs.org/cgi-bin/abstract.cgi/jpcafh/1998/102/i14/abs/jp9801267.html>

THOMSON  
ISI

**SCOPUS**

Completo

ORLANDO ROBERTO-NETO; E. Laura Coitiño; DONALD G. TRUHLAR

Dual-Level Direct Dynamics Calculations of Deuterium and Carbon-13 Kinetic Isotopic Effects for the Reaction Cl + CH<sub>4</sub>. Journal of Physical Chemistry A, v.: 102 24, p.: 4568 - 4578, 1998

Palabras clave: Atmospheric Chemistry; Kinetic Isotopic effects

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel ; Lugar de publicación: ACS, USA ; ISSN: 10895639

<http://pubs.acs.org/cgi-bin/abstract.cgi/jpcafh/1998/102/i24/abs/jp9807591.html>

THOMSON  
ISI

**SCOPUS**

Completo

E. Laura Coitiño; ENIO CIUFFARIN; FRANCA M. FLORIS; JACOPO TOMASI

Degenerate Lithium-Hydrogen Exchange Reactions: An Alternative Mechanism for Metalation of CH<sub>4</sub> in Gas Phase and Tetrahydrofuran Solution. Journal of Physical Chemistry A, v.: 102 43, p.: 8369 - 8376, 1998

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel ; Lugar de publicación: ACS, USA ; ISSN: 10895639

<http://pubs.acs.org/cgi-bin/abstract.cgi/jpcafh/1998/102/i43/abs/jp981463i.html>

THOMSON  
ISI

**SCOPUS**

Completo

JOAQUÍN ESPINOSA-GARCÍA; E. Laura Coitiño; ANGELS GONZÁLEZ-LAFONT; JOSE M. LLUCH

Reaction Path and Dual-Level Dynamics Calculations of the CH<sub>3</sub>F + OH Reaction. Journal of Physical Chemistry A, v.: 102 52, p.: 10715 - 10722, 1998

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel ; Lugar de publicación: ACS, USA ; ISSN: 10895639

<http://pubs.acs.org/cgi-bin/abstract.cgi/jpcafh/1998/102/i52/abs/jp9832138.html>

THOMSON  
ISI

**SCOPUS**

Completo

E. Laura Coitiño; MOLLI NOLAND; DONALD G. TRUHLAR

Correlated Capped Subsystem Method for the Calculation of Substituent Effects on Bond Energies.. Journal of Physical Chemistry A, v.: 101 7, p.: 1193 - 1197, 1997

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* ACS, USA ; *ISSN:* 10895639

<http://pubs.acs.org/journals/jpcafh/index.html>



Completo

E. Laura Coitiño; DONALD G. TRUHLAR

Systematic Analysis of Bond Energies Calculated by the Integrated Molecular Orbital-Molecular Orbital (IMOMO) Method.. Journal of Physical Chemistry A, v.: 101, p.: 4641 - 4645, 1997

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* ACS, USA ; *ISSN:* 10895639

<http://pubs.acs.org/cgi-bin/abstract.cgi/jpcafh/1997/101/i25/abs/jp970520p.html>



Sistema Nacional de Investigadores

Completo

E. Laura Coitiño; JACOPO TOMASI

Solvent Effects on the Internal Rotation of Neutral and Protonated Glyoxal.. Chemical Physics, v.: 204, p.: 391 - 402, 1996

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Elsevier, Holanda ; *ISSN:* 03010104

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/03010104>



Completo

OSCAR N. VENTURA; MARTINA KIENINGER; E. Laura Coitiño

Density functional study of the isomerization of fluoro-and chloroformaldehyde radical cations.. Journal of Computational Chemistry, v.: 17 11, p.: 1309 - 1317, 1996

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* John Wiley & Sons ; *ISSN:* 01928651

<http://www3.interscience.wiley.com/journal/33822/home>



Completo

E. Laura Coitiño; DONALD G. TRUHLAR; KEIJI MOROKUMA

Correlated Capped Subsystem Calculations as a Way to Include Electron Correlation Locally: A Test for Substituent Effects on Bond Energies.. Chemical Physics Letters, v.: 259, p.: 159 - 164, 1996

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Elsevier, Holanda ; *ISSN:* 00092614

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>



Sistema Nacional de Investigadores



Completo

E. Laura Coitiño; JACOPO TOMASI; ROBERTO CAMMI

On the Evaluation of the solvent Polarization Apparent Charges in the Polarizable Continuum Model: A new formulation.. Journal of Computational Chemistry, v.: 16 1, p.: 20 - 30, 1995

*Palabras clave:* Polarizable Continuum Model; Model extension; solvent polarization apparent charges

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* John Wiley & Sons, Inc ; *ISSN:* 01928651

<http://www3.interscience.wiley.com/journal/33822/home>



Completo

E. Laura Coitiño; ALBERTO PEREIRA; OSCAR N. VENTURA

High-level Ab Initio Prediction of the Structure and IR Spectra of Formaldehyde-Water Radical-Cation Complexes. Journal of Chemical Physics, v.: 102 7, p.: 2833 - 2840, 1995

*Palabras clave:* Structure and IR spectra; radical cation complexes

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* AIP, Chicago, USA ; *ISSN:* 00219606

<http://jcp.aip.org/>



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

Completo

ALBERTO PEREIRA; E. Laura Coitiño; OSCAR N. VENTURA

Ab initio Study of the Structure of Radical Cations Derived from H-bonded Complexes: A Comparison between [H<sub>2</sub>CO.H<sub>2</sub>O]<sup>+</sup> and [H<sub>2</sub>CO.HF]<sup>+</sup>.. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 314, p.: 31 - 38, 1994

*Palabras clave:* cation radical complexes; ab initio HF and MP2 modeling; effects of changing H acceptor

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Amsterdam, Holanda ; *ISSN:* 01661280

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00222860>



SCOPUS

Completo

E. Laura Coitiño; JACOPO TOMASI; OSCAR N. VENTURA

Importance of Water in Aldol Condensation Reactions of Acetaldehyde.. Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions, v.: 90 12, p.: 1745 - 1755, 1994

*Palabras clave:* acetaldehyde aldol condensation; water as catalyst and solvent; PCM localized orbital analysis

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* RSC, London, UK ; *ISSN:* 09565000

<http://www.rsc.org/Publishing/Journals/ft/Article.asp?Type=CurrentIssue>



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

Completo

E. Laura Coitiño; OSCAR N. VENTURA

Isomerization of the Formaldehyde radical cation and the failure of MP2. Chemical Physics Letters, v.: 202 6, p.: 479 - 482, 1993

*Palabras clave:* formaldehyde radical cation; isomerization; MP2 failure

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Elsevier, Netherlands ; *ISSN:* 00092614

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>



SCOPUS

Completo

E. Laura Coitiño; AGUSTÍ LLEDÓS; RAMÓN SERRA; JUAN BERTRÁN; OSCAR N. VENTURA

Ab Initio Study of Structure and Reactivity of  $\text{H}_2\text{CO}\cdot\text{H}_2\text{O}^+$  and related radical cations. Journal of the American Chemical Society, v.: 115 20, p.: 9121 - 9126, 1993

*Palabras clave:* radical cation complexes; structure and reactivity; ab initio HF and MP2 modeling

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* American Chemical Society, USA ; *ISSN:* 00027863

<http://pubs.acs.org/journals/jacsat/index.html>



SCOPUS

Completo

E. Laura Coitiño; OSCAR N. VENTURA; RAMÓN M. SOSA

Comparative Ab Initio and Semiempirical Study of Hydrogen-Bonded Complexes of Water and Ammonia.. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 254, p.: 315 - 328, 1992

*Palabras clave:* Performance métodos cuánticos; complejos de  $\text{NH}_3$  y  $\text{H}_2\text{O}$

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Amsterdam, Holanda ; *ISSN:* 01661280



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

Completo

OSCAR N. VENTURA; E. Laura Coitiño; AGUSTÍ LLEDÓS; JUAN BERTRÁN

Analysis of the Gas-Phase Addition of Water to Formaldehyde. A Semiempirical and Ab Initio Study of Simultaneous General Acid and Base Catalysis by  $\text{H}_2\text{O}$ .. Journal of Computational Chemistry, v.: 13 9, p.: 1037 - 1046, 1992

*Palabras clave:* Performance de métodos cuánticos; catálisis bifuncional por agua; Hidratación de aldehídos

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* John Wiley & Sons, Inc ; *ISSN:* 01928651

<http://www3.interscience.wiley.com/journal/33822/home?CRETRY=1&SRETRY=0>



SCOPUS

Completo

E. Laura Coitiño; OSCAR N. VENTURA

Theoretical Studies of Hydrogen-Bonded Complexes Using Semiempirical Methods. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 210, p.: 405 - 426, 1990

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Amsterdam, Holanda ; *ISSN:* 01661280

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/01661280>



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

Completo

E. Laura Coitiño; KENNETH IRVING; JOSÉ RAMA; OSCAR N. VENTURA

Comparison of Semiempirical and BSSE Corrected Möller-Plesset Ab Initio Calculations on the Direct Addition of Water to Formaldehyde.. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 210, p.: 427 - 440, 1990

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Amsterdam, Holanda ; *ISSN:* 01661280

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/01661280>



SCOPUS

Completo

OSCAR N. VENTURA; E. Laura Coitiño; AGUSTÍ LLEDÓS; JUAN BERTRÁN

AM1 Study of -hydrogen-Bonded Complexes of Water. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 177, p.: 55 - 68, 1989

*Palabras clave:* Performance AM1 en complejos de enlace hidrógeno

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Amsterdam, Holanda ; *ISSN:* 01661280

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/01661280>

Este trabajo fue el primero donde se comparó la performance de una serie de métodos generados en esa época para describir el enlace de hidrógeno en complejos de agua, reportando fortalezas y debilidades.



Completo

E. Laura Coitiño; OSCAR N. VENTURA

Aplicación de métodos semiempíricos derivados del MNDO a la determinación de la estructura y la reactividad de complejos de enlace de hidrógeno.. Folia Chimica Theoretica Latina, p.: 191 - 223, 1989

*Palabras clave:* Métodos semiempíricos; Sistemas con enlace de hidrógeno; modelado estructura y reactividad

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* CSIC, Madrid, España ; *ISSN:* 03784843 ; *DOI:* No tiene, dejó de editarse en 2000

<http://www.latindex.unam.mx/buscador/ficRev.html?opcion=1&folio=6821>

La revista se editó entre 1973 y 2000. Con frecuencia trimestral publicaba resúmenes de trabajos ya publicados de miembros de la Sociedad Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, y trabajos originales de puesta a punto en temas de relevancia e impacto en el área, los cuales eran referenciados. En particular este trabajo original de revisión recibió en 1992 el premio al mejor trabajo publicado en el bienio 1989-1991.



## No Arbitrados

Completo

ROZEEANNE STECKLER; YAO-YUAN CHUANG; PATTON L. FAST; E. Laura Coitiño; JOSÉ C. CORCHADO; DONALD G. TRUHLAR  
POLYRATE: A Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics (version 7.3.1). Quantum Chemistry Exchange Program bulletin, v.: 17, p.: 34 - 36, 1997

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Bloomington, Indiana, USA ; *ISSN:* 08897514

<http://205.247.101.11:90/kids/1900.1928/search/aQuantum+Chemistry+Program+Exchange./aquantum+chemistry+program+exchange/-3%2C-1%2C0%2CE/frameset&FF=aquantum+chemistry+program+exchange&1%2C1%2C>

## Artículos aceptados

### Libros

Libro publicado , Texto integral

E. Laura Coitiño; TRUHLAR, D.G.

Polyrate 2015 - Manual. 2015. *Número de volúmenes:* 1, *Nro. de páginas:* 592,

*Editorial:* Minneapolis

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Cinética

*Medio de divulgación:* Internet;

[http://comp.chem.umn.edu/polyrate/150128\\_Manual\\_for\\_POLYRATE2015.pdf](http://comp.chem.umn.edu/polyrate/150128_Manual_for_POLYRATE2015.pdf)

Jingjing Zheng, Shuxia Zhang, Benjamin J. Lynch, José C. Corchado, Yao-Yuan Chuang, Patton L. Fast, Wei-Ping Hu, Yi-Ping Liu, Gillian C. Lynch, Kiet A. Nguyen, Charles F. Jackels, Antonio Fernandez Ramos, Benjamin A. Ellingson, Vasilios S. Melissas, Jordi Villà, Ivan Rossi, Elena. L. Coitiño, Jingzhi Pu, Titus V. Albu Department of Chemistry Chemical Theory Center, and Supercomputing Institute University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota 55455 Artur Ratkiewicz Institute of Chemistry University of Bialystok, Poland Rozeanne Steckler Northwest Alliance for Computational Science & Engineering Oregon State University, Corvallis, Oregon 97331 Bruce C. Garrett Environmental Molecular Sciences Laboratory Pacific Northwest National Laboratory, Richland, Washington 99352 Alan D. Isaacson Department of Chemistry and Biochemistry Miami University, Oxford, Ohio 45056 and Donald G. Truhlar Department of Chemistry, Chemical Theory Center, and Supercomputing Institute University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota 55455



Libro publicado , Texto integral

E. Laura Coitiño; M. KÖNCKE; A. PITTINI

Fisicoquímica Moderna para Ciencias de la Vida - Manual de Laboratorio Computacional. 2010.

*Palabras clave:* Fisicoquímica Moderna; Mecánica y Química Cuántica; Espectroscopía Molecular fundamental; Termodinámica Estadística

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Fisicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Otra institución nacional / Comisión Sectorial de Enseñanza, Universidad de la República / Apoyo financiero

en construcción

Proyecto institucional seleccionado como prioritario en Facultad de Ciencias en 2009. Apoyado en 2010 por la Comisión Sectorial de Enseñanza para actualizar y publicar el texto en formato papel y digital (DVD). En estos momentos se encuentra en proceso de actualización y revisión del material, estando prevista la entrega del mismo a diciembre 2010.

## Trabajos en eventos

Resumen

C. MATHÓ; E. Laura Coitiño

Orientando el estudio de nuevas variantes génicas en la enfermedad de von Hippel-Lindau mediante aplicación de herramientas de modelado molecular , 2017

*Evento:* Nacional , Congreso Nacional de Biociencias , Montevideo , 2017

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Medio de divulgación:* Internet;

<http://opc.biociencias.gegamultimedios.net/opc/index.php?page=buscarProgramaExtendido&key=NDQ=>

Resumen

E. Laura Coitiño; L. TURELL; D. VITTURI; B. ÁLVAREZ; F. SCHOPFER

Thio-Michael addition of biothiols to conjugated nitrolinoleic acids (NO<sub>2</sub>CLA): experiment-theory interplay for explaining a bifasic kinetics , 2016

*Evento:* Internacional , Quitel2016: XLII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Montevideo , 2016

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Nitrolinoleico conjugado; mecanismo tio-Michael; Modelo QM

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional QM de mecanismos de reacción

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

<http://quitel2016.org.uy/en/contributed-telk-coitino-laura/>

Resumen

STEPHANIE PORTILLO; J. BONANATA; E. Laura Coitiño

Modulating the Reactivity of Biological Thiols and the Mechanism of Reaction with H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> by Hydrogen Bonding in Their Local Environments , 2016

*Evento:* Internacional , 56th Sanibel Symposium , St. Simons Island , 2016

*Anales/Proceedings:* 56th Sanibel Symposium Arbitrado: SI

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de proteínas, QM/MM, dinámica molecular

*Medio de divulgación:* Internet;

Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero; Comisión Central de Dedicación

Total / Apoyo financiero

[http://www.qtp.ufl.edu/sanibel/Abstracts/2016/Oral%20Contributed/Coniti%C3%B1o\\_Laura.pdf](http://www.qtp.ufl.edu/sanibel/Abstracts/2016/Oral%20Contributed/Coniti%C3%B1o_Laura.pdf)

El financiamiento parcial solicitado a CSIC-UdelaR está en proceso de evaluación en este momento. No se tiene certeza aún de contar con el mismo y sus montos, aunque no habiendo pedido apoyos en 2015, se espera obtenerlo.

## Resumen

F. KLEIN; FLORENCIA FERRARO; A. MERLINO; E. Laura Coitiño

Modeling the Interaction of Oleic Acid with two  $\alpha$ -Lactalbumin Folding Variants: in Route towards Deciphering the Molecular Basis of HAMLET's Antitumoral Activity , 2016

*Evento:* Internacional , 56th Sanibel Symposium , St. Simons Island, GA, USA , 2016

*Anales/Proceedings:* 56th Sanibel Symposium Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de proteínas, QM/MM, dinámica molecular

*Medio de divulgación:* Internet;

Comisión Central de Dedicación Total / Apoyo financiero; Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

[http://www.qtp.ufl.edu/sanibel/Abstracts/2016/Poster/Coiti%C3%B1o\\_Laura%20POSTER.pdf](http://www.qtp.ufl.edu/sanibel/Abstracts/2016/Poster/Coiti%C3%B1o_Laura%20POSTER.pdf)

El pedido apoyo financiero a CSIC-UdelaR se encuentra en evaluación por parte de dicho organismo, por lo que al presente se desconoce si se obtendrá y en que magnitud. No habiendo solicitado apoyos a CSIC durante 2014, y trabajando en régimen de Dedicación Total a la UdelaR, es de esperar que el mismo se obtenga. El resto del financiamiento es provisto por la partida central especial del régimen de DT de la expositora.

## Resumen

F. FERRARO; F. KLEIN; A. MERLINO; E. Laura Coitiño

En route to decipher the molecular basis of HAMLET's antitumoral activity: a comparison of  $\alpha$ -Lactalbumin interactions with oleic and stearic acids , 2016

*Evento:* Internacional , 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression, Quito 2016 , Montevideo , 2016

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* HAMLET; Oleic acid; Lactalbumin

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de estructura de complejos ligando-proteína

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

## Resumen

S. SASTRE; A. MERLINO; E. Laura Coitiño

Exploring the nature of the catalytic mechanism of a soluble NADH-dependent Fumarate Reductase from *Trypanosoma cruzi* , 2016

*Evento:* Internacional , 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression, Quito 2016 , Montevideo , 2016

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Fumarate reductase; *T. cruzi*; Catalytic mechanism

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional DFT-PCM de mecanismos de reacción

*Medio de divulgación:* Internet;

## Resumen

S. PORTILLO; G. FERRER-SUETA; A. ROITBERG; E. Laura Coitiño

pKas of the catalytic cysteine residues of human peroxiredoxin 5 , 2016

*Evento:* Internacional , 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression, Quito 2016 , Montevideo , 2016

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Cys pKa; constant pH MD; Peroxiredoxin5

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado de pKa de residuos proteicos por cpH-MD

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

## Resumen

A. CANTOU; E. Laura Coitiño

Reactivity trends in a series of biothiols towards their Michael addition on a model of conjugated nitrolinoleic acid , 2016

*Evento:* Internacional , 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expressión, Quitel2016 , Montevideo , 2016

*Palabras clave:* Tio-Michael reaction; DFT-PCM; nitrolinoleic acid

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional QM de mecanismos de reacción

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

## Resumen

J. BONANATA; J. M. LLUCH; A. GONZÁLEZ-LAFONT; E. Laura Coitiño

Comparison between Additive and Subtractive QM/MM Schemes on the Reaction of Cys34 Sulfenate of HSA with H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> , 2016

*Evento:* Internacional , 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expressión, Quitel2016 , Montevideo , 2016

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Albúmina sérica; Oxidación por H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional QM/MM de mecanismos de reacción en proteínas

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

<http://quitel2016.org.uy/en/contributed-talk-bonanata-jenner/>

PEDECIBA-Química

## Resumen

J. BONANATA; E. Laura Coitiño

QM/MM (ONIOM) study of the reaction catalyzed by ethanolamine ammonia lyase , 2016

*Evento:* Internacional , 10th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications , Castelló de la Plana , 2016

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* H abstraction; Ethanolamine utilization

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de estructura y propiedades de moléculas y macromoléculas

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

PEDECIBA-Química

## Resumen

STEPHANIE PORTILLO; E. Laura Coitiño; G. FERRER-SUETA

H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> reduction mechanism and the competition between resolution and overoxidation in human peroxiredoxin-5 , 2015

*Evento:* Internacional , 2nd International Symposium: "Thiol metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions" , Montevideo , 2015

*Anales/Proceedings:* E-BOOK 2nd International Symposium: "Thiol metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions" Arbitrado: SI

*Palabras clave:* reaction mechanism; kinetics; ONIOM QM/MM

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*Medio de divulgación:* Internet;

## Resumen

J. BONANATA; B. ÁLVAREZ; E. Laura Coitiño

Effects of glycation of human serum albumin on the properties of its free thiol: A computational study , 2015

*Evento:* Internacional , Elena Laura Coitiño Izaguirre , Montevideo , 2015

*Anales/Proceedings:* E-BOOK 2nd International Symposium: "Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions" Arbitrado: SI

*Palabras clave:* albumin glycation; molecular dynamics simulations; cystein thiol properties

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*Medio de divulgación:* Internet;

## Resumen

J. BONANATA; STEPHANIE PORTILLO; B. ÁLVAREZ; E. Laura Coitiño

Protein Sulfenic Derivatives in a Redox Crossroad: Mechanistic Insights from Representative Models of Oxidation by H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> and Reduction by Ascorbate , 2015

*Evento:* Internacional , 2nd International Symposium: "Thiol metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions" , Montevideo , 2015

*Anales/Proceedings:* E-BOOK 2nd International Symposium: "Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions" Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Sulfenic acid reactivity; Computational modeling; Reduction by ascorbate; Oxidation by H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*Financiación/Cooperación:* Comisión Central de Dedicación Total / Apoyo financiero

## Resumen

PORTILLO-LEDESMA, S.; FERRER-SUETA, G.; E. Laura Coitiño

Modeling the catalytic cycle of the atypical 2-Cys PRDX5: roles of active-site residues and folding , 2015

*Evento:* Internacional , Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology , Salto, Uruguay , 2015

*Anales/Proceedings:* Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology 2015 Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Mecanismos enzimáticos; Biofísica Computacional; eficiencia catalítica

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel; ISSN/ISBN: 978-987-27591-;

Comisión Académica de Posgrado / Beca; Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero;

Biophysical Society / Beca

<http://masbiofisica.fcien.edu.uy/latin-american-crosstalk-in-biophysics-sbf-uy-sab>

## Resumen

E. RODRÍGUEZ; F. MOSQUILLO; L. PÉREZ-DÍAZ; GA, ECHEVERRÍA; O.E. PIRO; A. MERLINO; E. Laura Coitiño; L. OTERO; D. GAMBINO

Aromatic amine N-oxide organometallic compounds: searching for prospective agents against Trypanosoma cruzi. , 2015

*Evento:* Regional , 5o. Simposio Latinoamericano de Química de Coordinación y Organometalica &#8208; 5o. SILQCOM , Angra dos Reis, Brasil , 2015

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* N-oxide Pt/Pd anti-T. cruzi species; DFT-PCM characterization; Fumarate Reductase Molecular Docking

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional sistemas interés biológico, QM/MM, dinámica molecular

Comisión Académica de Posgrado / Beca; Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero;

## Medicinal

*Medio de divulgación:* Internet;

[http://www.silqcom2015.com.br/arquivos/track1\\_full\\_1.pdf](http://www.silqcom2015.com.br/arquivos/track1_full_1.pdf)

Resumen

F. ORTIZ; J. BONANATA; E. Laura Coitiño

In silico Approach to Human Serum Albumin (HSA) Early Glycation Mechanism , 2015

*Evento:* Internacional , Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology (SBF.uy-SAB) , Salto Grande, Salto, Uruguay , 2015

*Anales/Proceedings:* Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology. SBF.uy-SABArbitrado: SI

*Palabras clave:* Biofísica de proteínas; glicación de albúmina; PTMs por glucosa en Lys195

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional sistemas interés biológico, QM/MM, dinámica molecular

*Medio de divulgación:* Internet;

<http://masbiofisica.fcien.edu.uy/latin-american-crosstalk-in-biophysics-sbf-uy-sab>

Resumen

F. KLEIN; E. Laura Coitiño

Histone H1's Lys/Arg Glycation: Structural Consequences and Synergy with Oxidation , 2015

*Evento:* Internacional , Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology (SBF.uy-SAB) , Salto Grande, Salto, Uruguay , 2015

*Anales/Proceedings:* Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology (SBF.uy-SAB)Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Biofísica de proteínas; Sinergia glicación-oxidación en histonas; PTM por D-ribosa y metilgloxal

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de proteínas, QM/MM, dinámica molecular

*Medio de divulgación:* Internet;

<http://masbiofisica.fcien.edu.uy/latin-american-crosstalk-in-biophysics-sbf-uy-sab>

Resumen

J. BONANATA; B. ÁLVAREZ; E. Laura Coitiño

Effects of Cys34 S-cysteinylation on the Tendency to Glycate of Arg/Lys Residues in Human Serum Albumin , 2015

*Evento:* Internacional , Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology (SBF.uy-SAB) , Salto Grande, Salto, Uruguay , 2015

*Anales/Proceedings:* Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology. SBF.uy-SABArbitrado: SI

*Palabras clave:* Biofísica de proteínas; glicación de albúmina; cisteinilación del tiol Cys34 de albúmina humana

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de proteínas, QM/MM, dinámica molecular

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

<http://masbiofisica.fcien.edu.uy/latin-american-crosstalk-in-biophysics-sbf-uy-sab>

Resumen

STEPHANIE PORTILLO; D. VÁZQUEZ; J. SANTOS; E. Laura Coitiño; G. FERRER-SUETA

Study of the Fully Folded-Locally Unfolded Transition and the Resolution Step in Human Peroxiredoxin 5 , 2015

*Evento:* Internacional , 23rd Congress of the Internatl. Union for Biochemistry&Molecular Biol. (IUBMB) & 44th Annual Meeting of the Brazilian Society for Biochemistry and Mol. Biol. , Foz de Iguacu, PR, Brasil , 2015

*Anales/Proceedings:* 23rd IUBMB Congress & 44th Annual Meeting SBBqArbitrado: SI

*Palabras clave:* Molecular simulations of Protein folding; Peroxiredoxin 5 FF-LU transition

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional sistemas interés biológico, QM/MM, dinámica molecular

*Medio de divulgación:* Internet;

<http://www.sbbq.org.br/iubmb2015/cdrom/indiceautor.htm#C>

#### Resumen

E. RODRÍGUEZ ARCE; M.F. MOSQUILLO; L. PÉREZ-DÍAZ; G. ECHEVERRÍA; O. E. PIRO; A. MERLINO; E. Laura Coitiño; L. OTERO; D. GAMBINO

Derivados de ferroceno de un N-óxido de amina aromática: búsqueda de potenciales agentes contra Trypanosoma cruzi , 2015

*Evento:* Nacional , 4to Encuentro Nacional de Química (ENAQUI) 2015 , Montevideo , 2015

*Anales/Proceedings:* Cuarto Encuentro Nacional de Química , 55 , 55 Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Compuestos de Pt/Pd anti-T. cruzi; Inhibición de Fumarato Reductasas; Mecanismo de acción

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional sistemas interés biológico, QM/MM, dinámica molecular

*Medio de divulgación:* Internet;

<http://www.enaqui4.fq.edu.uy/>

#### Resumen

E. Laura Coitiño; B. ÁLVAREZ; J. BONANATA; G. FERRER-SUETA; S. PORTILLO

New insights on the mechanism of biological thiols oxidation by H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>: post-transition state bifurcations in the reaction pathways , 2014

*Evento:* Internacional , 10th Triennial Conference of the World Association of Theoretical and Computational Chemists – WATOC 2014 , Santiago de Chile, Chile , 2014

*Anales/Proceedings:* WATOC Abstract Book Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Puntos de bifurcación post-TS

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

<http://watoc2014.com/website/abstract-book/>

#### Resumen

E. Laura Coitiño; A. M. FERREIRA; H. RUBBO; V. VEROLI

Shedding light on the interaction mode of fatty acid nitroalkenes as agonists of the nuclear receptor PPAR $\gamma$  , 2014

*Evento:* Internacional , 10th Triennial Conference of the World Association of Theoretical and Computational Chemists – WATOC 2014 , Santiago de Chile, Chile , 2014

*Anales/Proceedings:* WATOC Abstract Book Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Interacción Nitroalquenos de ácidos grasos-PPAR

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

<http://watoc2014.com/website/abstract-book/>

#### Resumen

F. KLEIN; E. Laura Coitiño

In silico studies of Histone H1's early glycation by Ribose/Adenosine diphosphate (ADP); ribose and its synergy with protein oxidation , 2014

*Evento:* Internacional , 10th Triennial Conference of the World Association of Theoretical and Computational Chemists – WATOC 2014 , Santiago de Chile, Chile , 2014

*Anales/Proceedings:* WATOC Abstract Book Arbitrado: SI

*Palabras clave:* glicación de Histona H1 por ribosa

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

<http://watoc2014.com/website/abstract-book/>

## Resumen

J. BONANATA; B. ÁLVAREZ; E. Laura Coitiño

Modeling the reaction mechanism of sulfenic acid oxidation by hydrogen peroxide , 2014

*Evento:* Internacional , 10th Triennial Conference of the World Association of Theoretical and Computational Chemists – WATOC 2014, , Santiago de Chile, Chile , 2014

*Anales/Proceedings:* WATOC Abstract BookArbitrado: SI

*Palabras clave:* Reactividad del tiol de albúmina

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

<http://watoc2014.com/website/abstract-book/>

## Resumen

A. MERLINO; C. MATHÓ; G. SANSÓ; P. PENNISI; E. Laura Coitiño

Stability and Dynamics of VBC#8208;HIF Complexes under Normoxic and Hipoxic conditions , 2014

*Evento:* Internacional , 10th Triennial Conference of the World Association of Theoretical and Computational Chemists – WATOC 2014, , Chile , 2014

*Anales/Proceedings:* WArbitrado: SI

*Palabras clave:* reconocimiento multiproteínas; interacción pVHL-HIF-1alfa

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

<http://watoc2014.com/website/abstract-book/>

## Resumen

STEPHANIE PORTILLO; G. FERRER-SUETA; E. Laura Coitiño

Unveiling the role of Threonine44 in the catalytic mechanism of human Peroxiredoxin 5 , 2014

*Evento:* Internacional , 10th Triennial Conference of the World Association of Theoretical and Computational Chemists – WATOC 2014, , Santiago de Chile, Chile , 2014

*Anales/Proceedings:* WATOC Abstract BookArbitrado: SI

*Palabras clave:* Efectos de mutación T44V en peroxiredoxina V

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Comisión Académica de Posgrado / Beca

<http://watoc2014.com/website/abstract-book/>

## Resumen

GLORIA CÁRDENAS-JIRÓN; A. MELLA; E. Laura Coitiño

Theoretical assessment of the photosensitization mechanisms of porphyrin#8208;ruthenium(II) complexes for the formation of reactive oxygen species , 2014

*Evento:* Internacional , 10th Triennial Conference of the World Association of Theoretical and Computational Chemists – WATOC 2014, , Santiago de Chile, Chile , 2014

*Anales/Proceedings:* WATOC Abstract BookArbitrado: SI

*Palabras clave:* Porfirinas para terapia fotodinámica; modelado computacional DFT/PCM

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Facultad de Ciencias - UDeLaR / Remuneración

<http://watoc2014.com/website/abstract-book/>

## Resumen

F. KLEIN; FLORENCIA FERRARO; I. MASTANDREA; S. CANCELA; A. MERLINO; E. Laura Coitiño

Modelos de la interacción entre el ácido oleico y la lactoalbúmina en HAMLET: camino a entender las causas de su actividad antitumoral , 2014

*Evento:* Nacional , XV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias, SUB 2014 , Piriápolis, Uruguay , 2014

*Anales/Proceedings:* Libro de resúmenes de las XV Jornadas de la SUBArbitrado: SI

*Palabras clave:* Interacciones proteína-lípido; HAMLET como anticancerígeno

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

<https://drive.google.com/viewerng/a/fcien.edu.uy/viewer?a=v&pid=sites&srcid=ZmNpZW4uZWZWR1LnV5fHN1YnxneDo0YjI2YjYzM2I1YTg1NjBm>

Trabajo enmarcado en Proyecto PAIE.CSIC 2014 del cual actué como tutora principal.

## Resumen

D. PÉREZ-ESCANDA; C. SAGASTI; J. BONANATA; E. Laura Coitiño

Profundizando en el conocimiento del mecanismo de la reacción de Michael entre nitroalquenos del ácido oleico y tioles , 2014

*Evento:* Internacional , XV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias, SUB 2014 , Piriápolis, Uruguay , 2014

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* nitroalquenos del ácido oleico; reacción de Michael; modelos QM del mecanismo

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Comisión Central de Dedicación Total / Apoyo financiero

<https://drive.google.com/viewerng/a/fcien.edu.uy/viewer?a=v&pid=sites&srcid=ZmNpZW4uZWZWR1LnV5fHN1YnxneDo0YjI2YjYzM2I1YTg1NjBm>

Nota: trabajo desarrollado como pasantía de iniciación a la investigación, actividad electiva de 3er año de la Lic. en Bioquímica.

Presentación parcialmente financiada (impresión de poster) con cargo a la partida de Dedicación Total de quien suscribe, actuando como tutora principal de la misa.

## Resumen

C. SAGASTI; D. PÉREZ-ESCANDA; E. Laura Coitiño

En busca del origen de la reactividad diferencial frente a tioles de nitroalquenos de los ácidos grasos oleico, linoleico y linoleico conjugado , 2014

*Evento:* Nacional , XV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias, SUB 2014 , Piriápolis, Uruguay , 2014

*Anales/Proceedings:* Libro de resúmenes de las XV Jornadas de la SUBArbitrado: SI

*Palabras clave:* nitroalquenos de ácidos grasos; patrones de reactividad; Modelado PCM/DFT

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*Medio de divulgación:* Internet;

<https://drive.google.com/viewerng/a/fcien.edu.uy/viewer?a=v&pid=sites&srcid=ZmNpZW4uZWZWR1LnV5fHN1YnxneDo0YjI2YjYzM2I1YTg1NjBm>

Trabajo que contó con apoyo financiero parcial (costo de ploteo del trabajo) de la partidada de DT de quien escribe para su presentación en formato poster en las jornadas de la SUB 2014

## Resumen

F. ORTIZ; J. BONANATA; E. Laura Coitiño

Aportando piezas claves para entender el mecanismo de apertura de la glucopiranosae en seroalbúmina humana camino a su glicación en K199. , 2014

*Evento:* Nacional , XV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias, SUB 2014 , Piriápolis, Uruguay , 2014

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* mecanismos de reacción en proteínas; glicación de albúmina; apertura de la glucosa

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Comisión Central de Dedicación Total / Apoyo financiero

<https://drive.google.com/viewerng/a/fcien.edu.uy/viewer?a=v&pid=sites&srcid=ZmNpZW4uZWZWR1LnV5fHN1YnxneDo0YjI2YjYzM2I1YTg1NjBm>

Trabajo preliminar de tesina de graduación de F. Ortiz, bajo tutoría principal de quien escribe y parcialmente financiado (costos de ploteo del trabajo) con cargo a la partida de DT.



#### Resumen

J. BENITEZ; G. SCALESE; S. ROSTAN; J. VARELA; H. CERECETTO; M. GONZÁLEZ; A. MERLINO; E. Laura Coitiño; I. CORREIA; J. COSTA-PESSOA; D. GAMBINO

Rational design of prospective antiparasitic oxidovanadium(IV) compounds based on Quantitative Structure-Activity Relationships. , 2014

*Evento:* Internacional , 9th International Vanadium Symposium: Chemistry, Biological Chemistry, & Toxicology (V9) , Padova, Italy , 2014

*Anales/Proceedings:* V9 - 9 th International Vanadium Symposium Chemistry, Biological Chemistry & Toxicology - Book of Abstracts

*Palabras clave:* Complejos de oxidovanadio(IV); Interacción con ADN; DFT-PCM y Docking ligando-proteína

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Inorgánica Medicinal

Modelado computacional de compuestos bioactivos

*Medio de divulgación:* Internet;

<http://www.chimica.unipd.it/V9/BoA.pdf>

#### Resumen

J. BONANATA; B. ÁLVAREZ; E. Laura Coitiño

SOBREOXIDACIÓN DE TIOLES BIOLÓGICOS: Estudio Computacional de la reacción de sulfenato (RSO) CON H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> , 2013

*Evento:* Internacional , 3er Encuentro Nacional de Ciencias Químicas, ENAQUI 3.0 , Montevideo , 2013

*Anales/Proceedings:* 3er Encuentro Nacional de Ciencias Químicas, ENAQUI 3.0 Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Sobreoxidación de tioles proteicos por H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado de la reactividad y cinética de tioles en proteínas

Química Teórica y Computacional; Bioinformática

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

<http://flavors.me/3enaqui>; [https://docs.google.com/file/d/0B33a5N-UESC\\_aTdXWW12TINaSjQ/edit](https://docs.google.com/file/d/0B33a5N-UESC_aTdXWW12TINaSjQ/edit)

#### Resumen

J. BONANATA; B. ÁLVAREZ; E. Laura Coitiño

Human serum albumin thiol pKa and mechanism of oxidation by hydrogen peroxide: a mixed experimental and computational approach , 2013

*Evento:* Internacional , VIII Meeting of the Society of Free Radical Biology and Medicine- South American Group Meeting , Buenos Aires , 2013

*Anales/Proceedings:* VIII Meeting of the Society Free Radical Biology and Medicine-South American Group (VIII SFRBM-SAG) Arbitrado: SI

*Palabras clave:* modelado QM/MM y MD de proteínas

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado de la reactividad, cinética y espectros IR de proteínas

*Medio de divulgación:* Papel;

[http://www.oxyclubcalifornia.org/SFRBM\\_SA/](http://www.oxyclubcalifornia.org/SFRBM_SA/); [http://viiiisfrbmsaregistration.senixsolutions.com.ar/pdf/POSTERS\\_SFRBM-SAG.pdf](http://viiiisfrbmsaregistration.senixsolutions.com.ar/pdf/POSTERS_SFRBM-SAG.pdf)

#### Resumen

STEPHANIE PORTILLO; B. KNOOPS; G. FERRER-SUETA; E. Laura Coitiño

Modulating Reactivity at the Peroxidatic Cysteine in Human Peroxiredoxin V , 2013

*Evento:* Internacional , International Symposium on Organic Reaction Mechanisms , Shenzhen, China , 2013

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Peroxiredoxina 5 ; mecanismo de reacción; cinética y pKa

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de enzimas y su mecanismo

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

C. MATHÓ; A. MERLINO; G. SANSÓ; P. PENNISI; E. Laura Coitiño

Estabilidad y dinámica de los complejos VBC-HIF-1&#945; en condiciones de normoxia e hipoxia , 2013

*Evento:* Nacional , 2das Jornadas +Biofísica , Montevideo , 2013

*Anales/Proceedings:* Libro de Resúmenes - Segundas Jornadas +Biofísica 2013Arbitrado: SI

*Palabras clave:* complejo multiproteico VBC-HIF; Energía de interacción en hipoxia/normoxia; Integración Termodinámica+MD

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Integración termodinámica - Simulación MD

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

*Medio de divulgación:* Papel;

masbiofisica.fcien.edu.uy

Trabajo integrado a la tesis doctoral de la M.Sc. Cecilia Mathó, desarrollada en Argentina en los aspectos experimentales. La labor de modelado se realiza 100% en cooperación con el LQTC- Facultad de Ciencias - UdelaR

## Resumen

I. MASTANDREA; E. Laura Coitiño

Sentando las bases para caracterizar in silico el mecanismo de reducción de [PtIV(NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Cl<sub>4</sub>] por tioles biológicos , 2013

*Evento:* Nacional , Segundas Jornadas +biofísica , Montevideo , 2013

*Anales/Proceedings:* Libro de Resúmenes - Segundas Jornadas +Biofísica 2013Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Compuestos anticancerígenos de PtIV; Reducción PtIV-PtII por tioles; Modelado DFT/PCM

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

masbiofisica.fcien.edu.uy

## Resumen

J. BONANATA; B. ÁLVAREZ; E. Laura Coitiño

Elucidación del mecanismo de sobreoxidación de la albúmina sérica humana por H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> por modelado computacional y FTIR , 2013

*Evento:* Nacional , Segundas Jornadas +biofísica , Montevideo , 2013

*Anales/Proceedings:* Libro de Resúmenes - Segundas Jornadas +Biofísica 2013Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Sobreoxidación de HSA por H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>; modelado QM/MM y MD de proteínas; FTIR

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Espectroscopía FTIR, Cinética

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

masbiofisica.fcien.edu.uy

## Resumen

F. KLEIN; E. Laura Coitiño

Reactividad comparada de residuos Lys de Histona H1 y su modificación post-traducción por glicación con ribosa , 2013

*Evento:* Nacional , Segundas Jornadas +biofísica , Montevideo , 2013

*Anales/Proceedings:* Libro de Resúmenes - Segundas Jornadas +Biofísica 2013Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Glicación de proteínas; Histona H1; mecanismo de reacción

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Espectroscopía FTIR, Cinética

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

masbiofisica.fcien.edu.uy

Trabajo premiado con Mención entre los 5 mejores posters del evento, defendido por Florencia Klein

## Resumen

A. MERLINO; E. Laura Coitiño

Modelado del dominio central de fumarato reductasas de *T. cruzi* y *L. major*: perspectivas para el diseño de inhibidores , 2013

*Evento*: Nacional , Segundas Jornadas +biofísica , Montevideo , 2013

*Anales/Proceedings*: Libro de Resúmenes - Segundas Jornadas +Biofísica 2013Arbitrado: SI

*Palabras clave*: Fumarato Reductasas; Estructura del sitio activo; interacción cofactor/sustrato

*Areas del conocimiento*: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

*Medio de divulgación*: Papel;

masbiofisica.fcien.edu.uy

## Resumen

V. VEROLI; M- LAMAS; A. M. FERREIRA; E. Laura Coitiño

Modelos de la interacción nitrolípidos- PPAR $\alpha$ : aportes para la comprensión y predicción de su capacidad agonista , 2013

*Evento*: Nacional , Segundas Jornadas +biofísica , Montevideo , 2013

*Anales/Proceedings*: Libro de Resúmenes - Segundas Jornadas +Biofísica 2013Arbitrado: SI

*Palabras clave*: nitrolípidos - interacción con PPAR $\alpha$ ; modelado QM/MM y MD de proteínas; activación de PPAR

*Areas del conocimiento*: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /

Química Teórica y Computacional; Bioinformática

*Medio de divulgación*: Papel;

*Financiación/Cooperación*: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

masbiofisica.fcien.edu.uy

## Resumen

S. PORTILLO-LEDESMA; G. FERRER-SUETA; E. Laura Coitiño

Reorganización Estructural del sitio activo de Prx5 disparada por la desprotonación de Cys47 , 2013

*Evento*: Nacional , Segundas Jornadas +biofísica , Montevideo , 2013

*Anales/Proceedings*: Libro de Resúmenes - Segundas Jornadas +Biofísica 2013Arbitrado: SI

*Palabras clave*: PrxV WT y mutantes; modelado QM/MM y MD de proteínas

*Areas del conocimiento*: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

*Medio de divulgación*: Papel;

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca; Otra institución nacional / Comisión Académica de

Posgrado, CAP, UdeLaR / Beca

masbiofisica.fcien.edu.uy

## Resumen

S. PORTILLO-LEDESMA; B. KNOOPS; G. FERRER-SUETA; E. Laura Coitiño

Insights into the reaction mechanism of hydrogen peroxide reduction by human peroxiredoxin 5: an ONIOM QM/MM and MD study , 2013

*Evento*: Internacional , XVIII International Workshop Quantum Systems in Chemistry, Physics & Biology , Paraty, Rio de Janeiro, Brasil , 2013

*Anales/Proceedings*: Libro de Resúmenes - XVII QSCP 2013Arbitrado: SI

*Palabras clave*: Peroxiredoxina 5 ; modelado QM/MM y MD de proteínas; Mecanismo de oxidación del tiol por H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>

*Areas del conocimiento*: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

*Medio de divulgación*: Papel;

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca; Comisión Sectorial de Investigación Científica -

UDeLaR / Apoyo financiero

<http://www.qscp2013.iq.ufrj.br/index.php>

## Resumen

M.V. VEROLI; S. PORTILLO-LEDESMA; A. TROTSCHANSKY; H. RUBBO; E. Laura Coitiño

MODULATION OF REACTIVITY AND BINDING OF UNSATURATED FATTY ACIDS BY NITRATION AND THEIR ENVIRONMENT , 2013

*Evento:* Internacional , XVIII International Workshop Quantum Systems in Chemistry, Physics & Biology , Paraty, Rio de Janeiro, Brasil , 2013

*Anales/Proceedings:* Libro de Resúmenes - XVIII QSCP 2013Arbitrado: SI

*Palabras clave:* modelado QM/MM y MD de proteínas; Modelado DFT/PCM de nitrolípidos

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

<http://www.qscp2013.iq.ufrj.br/index.php>

## Resumen expandido

STEPHANIE PORTILLO; E. Laura Coitiño; G. FERRER-SUETA

Structural and energetic aspects of peroxiredoxin 5 catalysis, an experimental and computational approach , 2013

*Evento:* Internacional , VIII Meeting of the Society of Free Radical Biology and Medicine- South American Group Meeting , Buenos Aires , 2013

*Anales/Proceedings:* VIII Meeting of the Society of Free Radical Biology and Medicine- South American Group MeetingArbitrado: SI

*Palabras clave:* eficiencia catalítica en peroxiredoxinas; reducción de tior por H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado de la reactividad, pKa y cinética de tioles en proteínas

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

[http://viiiisfrbmsaregistration.senixsolutions.com.ar/pdf/POSTERS\\_SFRBM-SAG.pdf](http://viiiisfrbmsaregistration.senixsolutions.com.ar/pdf/POSTERS_SFRBM-SAG.pdf)

## Resumen expandido

A. MERLINO; N. BRAS; M. J. RAMOS; H. RUBBO; E. Laura Coitiño

INSIGHTS INTO THE BINDING MODE OF 14-NO<sub>2</sub>AA TO PGHS-1 AND PGHS-2: CLUES FROM MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS TO PROPOSE INHIBITORY MECHANISMS , 2013

*Evento:* Internacional , Simposio Brasileiro de Química Teórica , Angra dos Reis, RJ, Brasil , 2013

*Anales/Proceedings:* Libro de Resúmenes - SBQT 2013Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Inhibición de PGHS-1/PGHS-2; Interacción inhibidor-proteína; Simulaciones de dinámica molecular

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

<http://sbqt2013.net.br/>

## Resumen

L. MININI; MERLINO; E. Laura Coitiño

Characterizing Lys/Arg Reactivity and Binding Features of  $\beta$ -Amyloid Peptide Variants Relevant to Alzheimer's Disease , 2012

*Evento:* Internacional , XVII QUITEL - Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Natal, RN, Brasil , 2012

*Anales/Proceedings:* XVII QUITEL - Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión LatinaArbitrado: SI

*Palabras clave:* Alzheimer; Glicación beta amiloide; ONIOM QM:QM

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Biológica

*Medio de divulgación:* CD-Rom;

<http://www.quitel2012.com/>

## Resumen

BONANATA; E. Laura Coitiño

Insights on the ethanolamine ammonia-lyase catalysis: strong pull-effect by Glu287 and NH<sub>3</sub><sup>+</sup>-protein H-bond network as puppeteers of substrate's transformation , 2012

*Evento:* Internacional , XVII QUITEL - Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Natal, RN, Brasil , 2012

*Anales/Proceedings:* XVII QUITEL - Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina Arbitrado: SI

*Palabras clave:* etanolamina amonio liasa; mecanismo de reacción; ONIOM QM/MM

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Biológica

*Medio de divulgación:* CD-Rom;

<http://www.quitel2012.com/>

## Resumen

SIGNORELLI, S.; E. Laura Coitiño; O. BORSANI; J. MONZA

Molecular Mechanisms for the Reaction Between .OH Radicals and Proline: Insights on the Role as ROS Scavenger in Plant Stress , 2012

*Evento:* Internacional , XVII QUITEL - Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Natal, RN, Brasil , 2012

*Anales/Proceedings:* XVII QUITEL - Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina Arbitrado: SI

*Palabras clave:* OH scavenger; H abstraction; Pro and derivatives; DFT/PCM modeling

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Biológica

*Medio de divulgación:* CD-Rom;

## Resumen

C. MATHÓ; A. MERLINO; G. SANSÓ; E. Laura Coitiño; P. PENNISI

ESTRUCTURA Y RECONOCIMIENTO MOLECULAR PARA UNA NUEVA VARIANTE (L163R) DE LA PROTEINA von HIPPEL-LINDAU (pVHL) , 2012

*Evento:* Internacional , XXIII Reunión Anual Sociedad Latinoamericana de Endocrinología Pediátrica (SLEP) , Montevideo, Uruguay , 2012

*Anales/Proceedings:* XXIII Reunión Anual Sociedad Latinoamericana de Endocrinología Pediátrica (SLEP) Arbitrado: SI

*Palabras clave:* complejo multiproteico VBC-HIF; variantes génicas pVHL; modelado y simulación AMBER

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Biológica

Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular / Enfermedad de von Hippel-

Lindau

*Medio de divulgación:* CD-Rom;

[www.slep2012.com](http://www.slep2012.com)

## Resumen

A. MERLINO; M. VIEITES; D. GAMBINO; E. Laura Coitiño

Modelado por homología de la enzima Fumarato Reductasa de Trypanosoma cruzi y Leishmania major. Estudio de la capacidad inhibitoria de complejos metálicos mediante docking molecular , 2012

*Evento:* Internacional , XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Piriápolis, Uruguay , 2012

*Anales/Proceedings:* XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Inhibición Fumarato Reductasas; T. cruzi & L. Major; Homología, docking y MD

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de proteínas y sus interacciones

*Medio de divulgación:* Papel;

<http://www.biociencias.org.uy/>

## Resumen

STEPHANIE PORTILLO; B .KNOOPS; G. FERRER-SUETA; E. Laura Coitiño

Catálisis enzimática de la peroxirredoxina V: mecanismo de reacción y función de los residuos conservados Thr44 y Arg127 , 2012

*Evento:* Nacional , XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Piriápolis, Uruguay , 2012

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Peroxirredoxina 5 ; Mecanismo de oxidación del tiol por H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>; modelado QM/MM y Cinética experimental

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de enzimas y su mecanismo

*Medio de divulgación:* Internet;

## Resumen

M.V. VEROLI; A. MERLINO; E. Laura Coitiño

Análisis de la interacción nitrolípidos-PPAR $\alpha$ : un enfoque molecular preliminar , 2012

*Evento:* Nacional , XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Piriápolis, Uruguay , 2012

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* nitrolípidos; interacción con PPAR $\alpha$

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de interacciones receptor-agonista

*Medio de divulgación:* Internet;

## Resumen

J. BONANATA; E. MÉNDEZ; B. ÁLVAREZ; E. Laura Coitiño

Modelado computacional y estudio experimental de propiedades del tiol de la albúmina sérica humana , 2012

*Evento:* Nacional , XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Piriápolis, Uruguay , 2012

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Albúmina Sérica humana; oxidación del tiol por H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>; Caracterización QM/MM y FTIR

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de enzimas y su mecanismo

*Medio de divulgación:* Internet;

## Resumen

E. Laura Coitiño

Computational Modeling Encounters with Medicinal and Biological Chemistry: contributions to drug optimization and to a better understanding of human pathologies. , 2011

*Evento:* Internacional , Winter Modelling 2011 , Pisa, Italia , 2011

*Anales/Proceedings:* Winter ModellingArbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Otra

<http://idea.sns.it/wintermodeling2011.php?lng=it&page=home>

Conferencia invitada, financiación a cargo de la partida de DT

## Resumen

STEPHANIE PORTILLO; G. FERRER-SUETA; E. Laura Coitiño

Cysteine thiol reactivity, H-bond patterns, and Transition State features in forming sulfenic acid by nucleophilic attack on H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>: how are they tuned by the environment? , 2011

*Evento:* Internacional , 1st Symposium "Thiol metabolism and redox regulation of cellular functions" , Punta Ballena, Maldonado , 2011

*Anales/Proceedings:* "Thiol metabolism and redox regulation of cellular functions"Arbitrado: SI

*Palabras clave:* oxidación tioles ; Formación de ácido sulfénico; Modelado DFT/PCM; efectos del entorno (DFT/PCM)

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

A. MERLINO; G. ALVAREZ; R. PEREZ-MONFORT; A. GOMEZ-PUYOU; M. GONZÁLEZ; H. CERECETTO; E. Laura Coitiño

Molecular docking studies and binding mode prediction of novel T. Cruzi triosephosphate isomerase inhibitors , 2011

*Evento:* Internacional , XL Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biología Molecular - SBBq , Foz de Iguazu, BRasil , 2011

*Anales/Proceedings:* XL Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biología Molecular - SBBqArbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Institución del exterior / Sociedade BRasileria de Bioquímica / Beca

[http://sbbq.iq.usp.br/v2/index.php?option=com\\_content&task=view&id=667&Itemid=131](http://sbbq.iq.usp.br/v2/index.php?option=com_content&task=view&id=667&Itemid=131)

## Resumen

SIGNORELLI, S.; J. DÍAZ; J. MONZA; E. Laura Coitiño

La prolina como capturador de radical hidroxilo , 2011

*Evento:* Nacional , 7mas Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular , Montevideo , 2011

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Radicales libres; antioxidantes; Modelado computacional; mecanismos moleculares de captura de OH; estrés en plantas

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Ciencias de las Plantas, Botánica

*Medio de divulgación:* Papel;

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca; Agencia Nacional de Investigación e Innovación /

Apoyo financiero

## Resumen

L. MININI; A. MERLINO; E. Laura Coitiño

Unravelling the mechanism of action of bioactive Pt/Pd-thiosemicarbazone complexes with the aid of conceptual DFT and Fukui indexes , 2011

*Evento:* Internacional , Quantum Bioinorganic Chemistry 3 , Cesky Krumlov, Republica Checa , 2011

*Anales/Proceedings:* Proceedings of the Quantum Bioinorganic Chemistry 3Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Pt/Pd bioactiva complexes; Fukui functions; DFT/PCM; anion radicals

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

[www.qbic2011.cz](http://www.qbic2011.cz)

## Resumen

J. BONANATA; E. Laura Coitiño

Assessing the Nature of the Protein H-bond Network on Substrate's Transformation at the Active Site of EAL-B12 , 2011

*Evento:* Internacional , 5th Theoretical Biophysics International Symposium , Funchal, Madeira, Portugal , 2011

*Anales/Proceedings:* 5th Theoretical Biophysics International SymposiumArbitrado: SI

*Palabras clave:* QM/MM ONIOM; Ethanolamina Ammonio Liasa

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

<http://www.compbiochem.org/theobio2011/>

## Resumen

E. Laura Coitiño; M. GONZÁLEZ; T. FERNÁNDEZ

Acercamiento a las percepciones de investigadores nacionales sobre temáticas de Cs Naturales a tratar y competencias científicas a incentivar en jóvenes al inicio del Bachillerato , 2011

*Evento:* Nacional , X Jornadas de Investigación de la Facultad de Ciencias Sociales , Montevideo , 2011

*Anales/Proceedings:* Facultad de Ciencias Sociales-X Jornadas de investigación. Derechos Humanos, seguridad y violencia.Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Competencias científicas

*Areas del conocimiento:* Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Otra institución nacional / Universidad de la República, Comisión Sectorial de Enseñanza / Apoyo financiero

Resumen

STEPHANIE PORTILLO; G. FERRER-SUETA; E. Laura Coitiño

Caracterización de la nucleofilia y pKa de la cisteína peroxidática (Cys47) de la peroxirredoxina V humana , 2011

*Evento:* Internacional , 7mas Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular , Montevideo , 2011

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Reactividad tioles; enfoque teórico-experimental integrado; pKa y nucleofilia

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

Resumen

J. BONANATA; A. MERLINO; M.F. CERDÁ; E. Laura Coitiño

Estudio comparado de la interacción ligando-proteína entre complejos [Re(V)O<sub>2</sub>L<sub>2</sub>]<sup>+1</sup> (L = diamina alifática) y albúmina sérica de origen bovino y humano , 2011

*Evento:* Nacional , ENAQUI, Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas , Montevideo , 2011

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Modelado por homología ; docking molecular ligando-proteína; caracterización DFT de compuestos de Re(V)

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Compuestos de Re(V)

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M.V. VEROLI; STEPHANIE PORTILLO; A. TROSTCHANSKY; H. RUBBO; E. Laura Coitiño

Modulación por nitración de la reactividad y la capacidad de interacción de ácidos grasos insaturados , 2011

*Evento:* Nacional , 7mas Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular , Montevideo

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* nitrolípidos; Modelado DFT/PCM; reactividad y reconocimiento molecular

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

C. MATHÓ; A. MERLINO; G. SANSÓ; P. PENNISI; E. Laura Coitiño

Estructura y reconocimiento molecular para una nueva variante (L163R) de la proteína von Hippel-Landau , 2011

*Evento:* Nacional , 7mas Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular , Montevideo, Uruguay , 2011

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Modelado computacional; Complejos proteicos y mutaciones in silico; enfermedad de von Hippel-Landau

*Areas del conocimiento:* Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular / Endocrinología

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Institución del exterior / CONICET / Beca



Completo

E. Laura Coitiño; M. MIGUEZ

Bridging Expert and Novice Knowledge through the Collaborative Construction of Concept Maps in a Higher Education Learning Environment , 2010

*Evento:* Internacional , 4th International Conference on Concept Mapping , Viña del Mar, Chile , 2010

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Mapas conceptuales; educación superior; conocimiento experto y novato

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Aprendizaje colaborativo, aprendizaje profundo

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Otra institución nacional / Comisión Sectorial de Enseñanza, Universidad de la República / Apoyo financiero

<http://cmc.ihmc.us/cmc2010papers/cmc2010-213-poster.pdf>

Resumen

E. Laura Coitiño; A. CZERWONOGORA

Formando Docentes en la evaluación de aprendizajes estudiantiles con el apoyo de matrices de valoración , 2010

*Evento:* Regional , JORNADAS REGIONALES SOBRE LA FORMACIÓN EN DOCENCIA UNIVERSITARIA , Montevideo, Uruguay , 2010

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Enseñanza superior- evaluación formativa; Matrices de valoración; Formación de equipos académicos-docentes

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Educación Universitaria - Evaluación

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Otra institución nacional / Comisión Sectorial de Enseñanza, Universidad de la República / Apoyo financiero

<http://jornadasendocencia.blogspot.com/>

Resumen

E. Laura Coitiño; J. BONANATA; A. MERLINO; L. MININI; A. PITTINI; STEPHANIE PORTILLO

Fomentando la metacognición y el desarrollo de pensamiento autónomo y crítico desde ambientes de aprendizaje cooperativo/colaborativo en Físicoquímica Moderna , 2010

*Evento:* Regional , IV Foro de Innovaciones en Educación Superior , Montevideo, Uruguay , 2010

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Enseñanza Superior Innovadora; Integración de TICs; Mapas conceptuales; Rúbricas y Transparencia al Evaluar

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Otra institución nacional / Comisión Sectorial de Enseñanza / Apoyo financiero

<http://ivforoinnova.cse.edu.uy/publicacion/comunicaciones10.html>

Labor de investigación educativa, desarrollada en el encuadre de un proyecto de innovación de la enseñanza de grado (2009-2010) que obtuviera fondos por concurso a nivel de toda la UdeLaR.

Resumen

E. Laura Coitiño; M. GONZÁLEZ; V. LÓPEZ; STEPHANIE PORTILLO; A. SAADOUN

Fomento de las capacidades de investigación en cursos de grado: abordaje interdisciplinario de problemas en Ciencias de la Vida , 2010

*Evento:* Regional , IV Foro de Innovaciones en Educación Superior , Montevideo, Uruguay , 2010

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Formación multidisciplinaria por problemas; Investigación en Ciencias de la Vida

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Otros Tópicos Biológicos / Fisiología y Nutrición

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

<http://ivforoinnova.cse.edu.uy/publicacion/comunicaciones12.html>

## Resumen

E. Laura Coitiño; J. BONANATA; SIGNORELLI, S.

Increasing Complexity Models for Describing the Generation of Substrate Radicals at the Active Site of Ethanolamine Ammonia Lyase/B12 , 2010

*Evento:* Internacional , 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA) , Oviedo, España , 2010

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* etanolamina amonio-liasa; PCM polarización proteína; catálisis radicales

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

<http://www.espa2010.com/>

## Resumen

A. PITTINI; STEPHANIE PORTILLO; A. MERLINO; E. Laura Coitiño

DFT and Data Mining Characterization of a Series of Pt(IV) Prospective Anticancer Agents and their Pt(II) Metabolites , 2010

*Evento:* Internacional , IX Girona Seminar Electron Density, Density Matrices, and Density Functional Theory , Girona, España , 2010

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* anticancerígenos Pt(IV); descriptores DFT; Clasificación HCA PCA; diseño racional de fármacos

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

<http://iqc.udg.edu/gs2010/>

## Resumen

J. BONANATA; A. MERLINO; M. F. CERDÁ; E. Laura Coitiño

In silico characterization of the interaction of a series of [ReO<sub>2</sub>L<sub>2</sub>]<sup>+</sup> Complexes with Serum Albumin , 2010

*Evento:* Internacional , 1st International Conference on Bioinformatics SolBio 2010 , Termas del Chillán, Chile , 2010

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Complejos de Re(V); Interacción con albúmina; Docking y modelado DFT

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Quimioinformática/Bioinformática/Minería de Datos

*Medio de divulgación:* Otros;

*Financiación/Cooperación:* Sin financiamiento / Cooperación

<http://cbsm.utralca.cl/soibio2010/>

## Resumen

A. MERLINO; STEPHANIE PORTILLO; L. BONILLA; A. TROTSCHANSKY; H. RUBBO; E. Laura Coitiño

Insights into the mechanism of binding of nitro fatty acids to mammalian COX-2 , 2010

*Evento:* Internacional , 1st International Conference on Bioinformatics SolBio 2010 , Termas del Chillán, Chile , 2010

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* nitración ácido araquidónico; Interacción COX-1 y COX-2; Molecular docking & DFT

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular

*Medio de divulgación:* Otros;

*Financiación/Cooperación:* Sin financiamiento / Cooperación

<http://cbsm.utralca.cl/soibio2010/>

Este trabajo constituye la primer presentación derivada de una cooperación iniciada en 2010 por E.L. Coitiño con el Dr. Homero Rubbo y su equipo en Facultad de Medicina centrada en la caracterización de la nitración de ácidos grasos y sus interacciones en el organismo.

## Resumen

SIGNORELLI, S.; MÖLLER, M.; E. Laura Coitiño; DENICOLA, A.

Lipid membrane solubility and permeability of nitrogen dioxide , 2009

*Evento:* Internacional , 16th Annual Meeting of SFRBM (Society of Free Radical Biology and Medicine) , San Francisco , 2009

*Anales/Proceedings:* FREE RADICAL BIOLOGY AND MEDICINE , 47Arbitrado: SI

*Palabras clave:* lipid membrane permeability; NO<sub>2</sub> vs NO; DFT-PCM modeling

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Biológica -Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

<http://www.sfrbm.org/16AnnualMeeting.php>

Presentado por la Dra. Denicola en USA

## Resumen

A. MERLINO; R. MARÍN; PABLO D. DANS; E.DAZA; E. Laura Coitiño

Singularidades del Compuesto Antitumoral Oxaliplatino Evidenciadas por Comparación de Potenciales Electroestáticos 3D. , 2009

*Evento:* Nacional , 6tas Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular , Montevideo, Uruguay , 2009

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Anticancerígenos Pt/PD; comparación 3D; Potencial Molecular Electroestático

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Biológica -Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Internet;

[http://www.iibce.edu.uy/SBBM/sextas\\_jornadas.html](http://www.iibce.edu.uy/SBBM/sextas_jornadas.html)

## Resumen

L. COUTO; E. Laura Coitiño

Caracterización detallada a nivel molecular y electrónico del mecanismo de activación por acución del antitumoral Picoplátin , 2009

*Evento:* Nacional , 6tas Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular , Montevideo, Uruguay , 2009

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* antitumorales de Pt; activación por acución; modelado DFT-PCM

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

[http://www.iibce.edu.uy/SBBM/sextas\\_jornadas.html](http://www.iibce.edu.uy/SBBM/sextas_jornadas.html)

Poster -

## Resumen

A. PITTINI; E. Laura Coitiño

Caracterización fisicoquímica de fármacos anti-cancerígenos de Pt(IV) y metabolitos principales. , 2009

*Evento:* Nacional , 6tas Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular , Montevideo, Uruguay , 2009

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* anticancerígenos Pt(IV); Validación metodológica

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

[http://www.iibce.edu.uy/SBBM/sextas\\_jornadas.html](http://www.iibce.edu.uy/SBBM/sextas_jornadas.html)

## Resumen

SIGNORELLI, S.; MÖLLER, M.; E. Laura Coitiño; DENICOLA, A.

Lipid membrane solubility and permeability of nitrogen dioxide , 2009

*Evento:* Internacional , Free Radicals and Antioxidants in Chile 2009VI Meeting of the SFRBM-South American Group , Santiago de Chile, Chile , 2009

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Físicoquímica Biológica, Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

[www.sfrbm-chile2009.cl](http://www.sfrbm-chile2009.cl)

Presentado por el Bach. Signorelli en Chile

## Resumen

E. Laura Coitiño

Characterizing the Influence of Local and Global Effects on the Interaction of B-DNA with Pt(II) and Ru(II) Complexes Relevant in Biomedical Applications , 2008

*Evento:* Internacional , XXXIV Conference of Theoretical Chemists of Latin Expression , Cetraro, Italia , 2008

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Institución del exterior / Comité organizador del evento / Apoyo financiero

<http://chimica.unical.it/chitel08/>

Conferencia plenaria invitada

## Resumen

PABLO D. DANS; E. Laura Coitiño; ALEJANDRO CRESPO; D. ESTRÍN

From Mono to Bifunctional Binding of Cisplatin to DNA: Characterizing the Sequence-Dependent DNA Structural Changes with QM/MM Methods , 2008

*Evento:* Internacional , Conference on modeling and computation of structure and dynamics of condensed phase systems - CPMD08 , Trieste, Italy , 2008

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* DNA-Cisplatin adducts; QM/MM modeling; Molecular dynamics

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Biofísica, Bioinformática

*Medio de divulgación:* Papel;

[http://cdsagenda5.ictp.trieste.it/full\\_display.php?ida=a07209](http://cdsagenda5.ictp.trieste.it/full_display.php?ida=a07209)

## Resumen

L. DARRÉ; M. MACHADO; E. Laura Coitiño

Characterizing  $[\text{Ru}(\text{bpy})_2\text{dppz}]^{2+}$  DNA probe intercalative behaviour at GG, GC, and CG steps , 2008

*Evento:* Internacional , International Conference on Drug Design and Discovery for Developing Countries , ICS-UNIDO, Trieste, Italia , 2008

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Ru molecular switches; DNA interactions; DNA damage sensors; Molecular dynamics

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

SIGNORELLI, S.; N, PUIG; M. MACHADO; E. Laura Coitiño

Tunneling and kinetic isotopic effects at the first step in the reaction catalyzed by ethanolamine ammonia lyase and B12 , 2007

*Evento:* Internacional , XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 07) , La Habana, Cuba , 2007

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* EAL kinetics; Protein environment effects; DFT & PCM modeling

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Enzimología computacional

*Medio de divulgación:* CD-Rom;

*Financiación/Cooperación:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

<http://karin.fq.uh.cu/quitel33/>

Comunicación oral seleccionada

## Resumen

PABLO D. DANS; E. Laura Coitiño

Aspectos mecanísticos de la interconversión directa e inversa del Cisplatino/Transplatino , 2007

*Evento:* Internacional , XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 07) , La Habana, Cuba , 2007

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* DFT - PCM; Cisplatin isomerization; Water assistance

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* CD-Rom;

*Financiación/Cooperación:* Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

<http://karin.fq.uh.cu/quitel33/>

## Resumen

E. Laura Coitiño; PABLO D. DANS; A. CASTRO

Gaining insight on how local and global environment tunes intrinsic reactivity of purines towards oxidative processes in DNA , 2007

*Evento:* Internacional , 6th International Conference of Biological Physics, 5th Southern Cone Biophysics Congress , Montevideo. 27-31 agosto 2007. , 2007

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* DNA reactivity; ONIOM; QM/MM; HF & PCM

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

PABLO D. DANS; G. MOURGLIA; E. Laura Coitiño

Water dynamics in the hydration layer around central base-pairs in DNA sequences relevant to its damage and treatment , 2007

*Evento:* Internacional , 6th International Conference of Biological Physics, 5th Southern Cone Biophysics Congress , Montevideo. 27-31 agosto 2007. , 2007

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Molecular dynamics; Hydration structure & dynamics; DNA hydration

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. MACHADO; L. DARRÉ; E. Laura Coitiño

Sequence Dependent  $[\text{Ru}(\text{bpy})_2\text{dppz}]^{2+}$ -DNA Complex Dynamical Behavior , 2007

*Evento:* Internacional , 6th International Conference of Biological Physics, 5th Southern Cone Biophysics Congress , Montevideo. 27-31 agosto 2007. , 2007

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Biofísica, Bioinformática

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

PABLO D. DANS; E. Laura Coitiño

Estudio de la hidratación de dos purinas centrales y su efecto en la reactividad de hexámeros de B-ADN simulados en condiciones fisiológicas , 2006

*Evento:* Nacional , V Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular -SBBM/SUB , Montevideo, Uruguay , 2006

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Biofísica, Bioinformática

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

G. MOURGLIA; PABLO D. DANS; E. Laura Coitiño

Análisis estructural comparativo del daño oxidativo secuencial del ADN GG  $\rightarrow$  8oxoGG  $\rightarrow$  sitio AP simulado en condiciones fisiológicas , 2006

*Evento:* Nacional , V Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular -SBBM/SUB , Montevideo, Uruguay

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

L. DARRÉ; M. MACHADO; E. Laura Coitiño

Modelado de la interacción del complejo  $[\text{Ru}(\text{bpy})_2\text{dppz}]^{2+}$  en un dodecámero de ADN: geometrías de intercalación y efectos sobre la estructura macromolecular. , 2006

*Evento:* Nacional , V Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular -SBBM/SUB , Montevideo, Uruguay , 2006

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño

Modern Physical Chemistry of Complex Systems: Establishing protocols for coping with problems of biological and biomedical interest. , 2006

*Evento:* Internacional , Eight Giambiagi Winter School Part B and Workshop "Research trends in clusters, biomolecules and materials." , Buenos Aires, Argentina , 2006

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

Comunicación invitada

#### Resumen

PABLO D. DANS; E. Laura Coitiño; ALEJANDRO CRESPO; D. ESTRÍN

A MD and QM/MM Characterization of Cisplatin-Guanine Monoadducts Embedded in B-DNA Hexamers under Physiological Conditions , 2006

*Evento:* Internacional , Eight Giambiagi Winter School Part B and Workshop "Research trends in clusters, biomolecules and materials." , Buenos Aires, Argentina , 2006

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

G. MOURGLIA; PABLO D. DANS; E. Laura Coitiño

Why do CpG and GpC steps display different reactivity patterns in DNA? , 2006

*Evento:* Internacional , Eight Giambiagi Winter School Part B and Workshop "Research trends in clusters, biomolecules and materials." , Buenos Aires, Argentina , 2006

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

E. Laura Coitiño; L. DARRÉ

Characterizing the Photophysical Behavior in Water of a Series of [Ru(II)L<sub>2</sub>(dppz)]<sup>2+</sup> Molecular Light Switches by PCM-TDDFT , 2006

*Evento:* Internacional , Eight Giambiagi Winter School Part B and Workshop "Research trends in clusters, biomolecules and materials." , Buenos Aires, Argentina , 2006

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

M. MACHADO; E. Laura Coitiño

One enzyme, one step in the catalyzed reaction mechanism and a continuum model to represent different local mediums at play , 2006

*Evento:* Internacional , Eight Giambiagi Winter School Part B and Workshop "Research trends in clusters, biomolecules and materials." , Buenos Aires, Argentina , 2006

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

PABLO D. DANS; E. Laura Coitiño

QSAR and Data-mining on Theoretical Predictors for the Anticancer Profile of a Series of 35 Pt/Pd Square-Planar Complexes , 2006

*Evento:* Internacional , Conference on Drug Development for the Third World , ICTP, Trieste, Italia , 2006

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Biofísica, Bioinformática

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

V. LEONE; E. Laura Coitiño

Characterizing molecular targets for early inhibition of in vivo Maillard reactions , 2006

*Evento:* Internacional , Conference on Drug Development for the Third World , ICTP, Trieste, Italia , 2006

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Biofísica, Bioinformática

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

[http://cdsagenda5.ictp.trieste.it/pdf\\_display.php?ida=a05207](http://cdsagenda5.ictp.trieste.it/pdf_display.php?ida=a05207)

## Resumen

E. Laura Coitiño; L. DARRÉ

Tuning [Ru(II)(dppz)L<sub>2</sub>]<sup>2+</sup> Molecular Light-Switches Electron Structure and Response by Environment: Computer-Aided Design of Sensors for Early Diagnosis of Genetic Diseases. , 2006

*Evento:* Internacional , Conference on Drug Development for the Third World , ICTP, Trieste, Italia , 2006

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

[cdsagenda5.ictp.trieste.it/pdf\\_display.php?ida=a05207](http://cdsagenda5.ictp.trieste.it/pdf_display.php?ida=a05207)

## Resumen

M. MACHADO; E. Laura Coitiño

Modelling the medium's effect over a step in the reaction catalysed by the enzyme Ethanolamine ammonia lyase , 2005

*Evento:* Internacional , XXXIV Reunião Anual da SBBq - 2 a 5 de julho de 2005 , Aguas de Lindoia, BRasil , 2005

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Ethanolamine Ammonia Lyase; DFT modeling; Protein environment effects; 1,2-NH<sub>3</sub> migration mechanism

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Enzimología computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Institución del exterior / Organizadores del evento / Apoyo financiero

<http://sbbq.iq.usp.br/arquivos/2005/cdlivro/index.htm>

Trabajo premiado con una beca para cubrir la participación del Bach. M. Machado

## Resumen

E. Laura Coitiño

Desafíos y demandas para el sector bioinformático: de la estructura de biomoléculas a la medicina molecular , 2005

*Evento:* Internacional , Taller "Perspectivas para el Desarrollo de la Bioinformática en el Uruguay" , LATU, Montevideo, Uruguay , 2005

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Biofísica, Bioinformática

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

M. MACHADO; E. Laura Coitiño

Efectos del entorno sobre la barrera y reorganización electrónica en la migración 1,2-NH<sub>3</sub> del sustrato del sistema etanolamina-amonioliasa/B12. , 2004

*Evento:* Internacional , 3eras Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular , Montevideo, Uruguay , 2004

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* EAL; Efectos del medio proteico; Enzimología Computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Enzimología computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Enzimología computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Sin financiamiento / Otra

Trabajo seleccionado como el mejor de su sección.



Resumen

V. LEONE; E. Laura Coitiño

Caracterización del mecanismo de glicación entre CH<sub>3</sub>NH<sub>2</sub> y glucosa y la acción catalítica del agua , 2004

*Evento:* Internacional , QUITEL 2004 – XXX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , 2004

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Biofísica, Bioinformática

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

PABLO D. DANS; E. Laura Coitiño

Análisis Estadístico con Descriptores Cuánticos DFT sobre una población de 21 Compuestos Análogos del Cisplatino. , 2004

*Evento:* Internacional , QUITEL 2004 – XXX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Porto, Portugal , 2004

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Biofísica, Bioinformática

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

PABLO D. DANS; E. Laura Coitiño

Estudio Teórico Comparativo del Mecanismo de la Reacción de Acuación de 7 Análogos Cuadrado-Planos de Pt(II) y Pd(II) del Cisplatino , 2004

*Evento:* Internacional , QUITEL 2004 – XXX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Porto, Portugal , 2004

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

Comunicación oral seleccionada

Resumen

E. Laura Coitiño; A. CASTRO

Análisis de la reactividad intrínseca de las nucleobases en secuencias de ADN relevantes frente a la acción de la Mitomicina C mediante cálculos ab initio . , 2002

*Evento:* Internacional , XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. , Montevideo, Uruguay , 2002

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño; V. LEONE

Glucosilación no enzimática de proteínas: mecanismo de las etapas tempranas del proceso y la inhibición de la formación de AGEs por etanol. , 2002

*Evento:* Internacional , XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. , Montevideo, Uruguay , 2002

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

A. SANABRIA; E. Laura Coitiño

Caracterización de la estructura electrónica de dominios HMG relevantes en el reconocimiento molecular de lesiones del ADN causadas por Cisplatino y análogos. , 2002

*Evento:* Internacional , XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. , Montevideo, Uruguay , 2002

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

K. CAL; E. Laura Coitiño; PABLO D. DANS; A. CASTRO

Modificaciones de la Estructura Electrónica de ADN Duplex tras la formación de aductos con Cisplatin u Oxaliplatin. , 2002

*Evento:* Internacional , XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. , Montevideo, Uruguay , 2002

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

PABLO D. DANS; E. Laura Coitiño

Análisis comparativo DFT de la estructura y reactividad de 11 compuestos análogos del Cisplatino con potencial acción antineoplásica. , 2002

*Evento:* Internacional , XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. , Montevideo, Uruguay , 2002

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

PABLO D. DANS; E. Laura Coitiño

Caracterización DFT de los procesos de hidrólisis del análogo del Cisplatino cis-bipiridina-dicloro-Pt(II) y sus aductos 1:1 con Guanina y Adenina. , 2002

*Evento:* Internacional , XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. , Montevideo, Uruguay , 2002

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

Comunicación oral seleccionada

## Resumen

A. CASTRO; E. Laura Coitiño

Análisis de la Reactividad intrínseca de las nucleobases en secuencias de ADN relevantes frente a la acción de agentes oxidantes , 2002

*Evento:* Nacional , X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias (SUB) , Balneario Solís, Uruguay , 2002

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

A. CASTRO; E. Laura Coitiño

How Purine Reactivity is Affected by Local Environments in DNA Sequences Relevant to Cisplatin and Oxidative Damage. , 2002

*Evento:* Internacional , Sanibel Symposium, 2002 , St. Augustine, Florida, USA , 2002

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

PABLO D. DANS; E. Laura Coitiño

Comparative Analysis of the hydrolysis of Cisplatin [Pt(II)(NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>] and its Pd(II) Square-planar Analogues. , 2002

*Evento:* Internacional , Sanibel Symposium, 2002 , St. Augustine, Florida, USA , 2002

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño

## Sistema Nacional de Investigadores

Un recorrido interesante en Química Biológica: del mundo cuántico al universo de los problemas de interés bioquímico , 2000

*Evento:* Internacional , XXVI Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Caxambú, MG, Brasil , 2000

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

Conferencia seleccionada

Resumen

PABLO D. DANS; E. Laura Coitiño

Análisis estructural a nivel HF y DFT de los aductos principales formados por el ADN con fármacos de la familia del Cisplatino , 2000

*Evento:* Internacional , XXVI Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. , Caxambú, MG, Brasil , 2000

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño; L. LUCCHINI; S. E. VÁZQUEZ

Exploring the Generation of Radical and Distonic Radical Cations of Ketenes by Ionization of 2-trans-Alkenals- Water Complexes. , 2000

*Evento:* Internacional , Xth International Congress of Quantum Chemistry , Menton, Francia , 2000

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

PABLO D. DANS; E. Laura Coitiño

Structural Consequences of the Pt-Pd Substitution in Anticancer Drugs. An Ab Initio HF and DFT Study of DNA Lesion Site Models , 2000

*Evento:* Internacional , Xth International Congress of Quantum Chemistry , Menton, Francia , 2000

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen expandido

DONALD G. TRUHLAR; YAO-YUAN CHUANG; E. Laura Coitiño; PATTON L. FAST; JOSÉ C. CORCHADO; CHRISTOPHER J. CRAMER

Thermochemistry, Solvation, and Dynamics. , 2000

*Evento:* Nacional , ACS National Symposium - Fall 1999 - Symposium CHEMISTRY OF REACTIVE INTERMEDIATES AND MODELING IN HYDROCARBON CONVERSION , New Orleans , 1999

*Anales/Proceedings:* American Chemical Society Division of Fuel Chemistry Preprints of Symposia , 44 , 452 , 458Arbitrado: SI

*Editorial:* ACS

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

<http://pubs.acs.org/cgi-bin/abstract.cgi/jpcafh/2000/104/i03/abs/jp993661v.html>

Resumen

E. Laura Coitiño; PABLO D. DANS

Modeling the Mechanism of Action of Antitumoral Drugs. A Quantum Mechanics Study of the DNA-cPd Interaction. , 1999

*Evento:* Internacional , Sanibel Symposium, 1999 , 1999

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño; F. FLORIS; JACOPO TOMASI

Modelado del mecanismo de reacciones de metalación en fase gaseosa y condensada con métodos Ab initio, DFT y el modelo PCM/IEF , 1998

*Evento:* Internacional , XXIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. , Puebla, México , 1998

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

Comunicación oral seleccionada

Resumen

C. CAPELLI; E. Laura Coitiño; JACOPO TOMASI

Effetti del solvente sulla caratterizzazione di stati di transizione e cammini di reazione: trasposizione di claisen , 1998

*Evento:* Internacional , XXIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. , Puebla, México , 1998

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

L. CARRASCO; E. Laura Coitiño

Contaminacion de spin: efectos sobre la estructura del estado de transicion y la barrera del canal principal de combustion del Metanol , 1998

*Evento:* Internacional , XXIV Congreso Internacional de Quimicos Teoricos de Expresion Latina. , Puebla, México , 1998

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

DONALD G. TRUHLAR; JOSÉ C. CORCHADO; Y.-Y. CHUANG; PATTON L. FAST; J. VILLA; E. Laura Coitiño

New Methods for Direct Dynamics Calculations of Reaction Rates of Combustion Reactions. , 1998

*Evento:* Internacional , Symposium on Chemistry of Combustion Processes National Meeting of the American Chemical Society , Dallas, Texas, USA , 1998

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño; O. ROBERTO-NETO,; DONALD G. TRUHLAR

Modeling Kinetics in Atmospheric Chemistry using Variational Transition State Theory: A Successful Story , 1998

*Evento:* Internacional , IAI and NASA Workshop: "Understanding Ozone and UV-B Radiation. Past Accomplishments and Future Opportunities" , Buenos Aires, Argentina , 1998

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño; DONALD G. TRUHLAR

A Systematic Analysis of Bond Energies Calculated by the IMOMO Method , 1998

*Evento:* Internacional , 9th International Congress of Quantum Chemistry , Atlanta, USA , 1998

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

DONALD G. TRUHLAR; Y.-Y. CHUANG; J.C. CORCHADO; PATTON FAST; E. Laura Coitiño

Dual Level Direct Dynamics Calculations of Rate Processes , 1997

*Evento:* Internacional , 214th National American Chemical Society Meeting. , Las Vegas, Nevada, USA , 1997

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, Teoría Variacional del Estado de Transición

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño; Y.-Y. CHUANG; DONALD G. TRUHLAR

Overcoming the Spin Contamination Effect at Open-Shell Transition states , 1997

*Evento:* Internacional , 9th International Congress of Quantum Chemistry , Atlanta, USA , 1997

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

L. LUCCHINI; E. Laura Coitiño; M. FORES; M. SOLÁ; M. DURÁN

Substituent Effects in a Series of Neutral and Cation Radical Complexes of Vinyl Alcohol with Proton Acceptors: A Quantum Molecular Similarity Measures Analysis using HF, MP2 and DFT Electron Densities. , 1997

*Evento:* Internacional , 9th International Congress of Quantum Chemistry , Atlanta, USA , 1998

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

E. Laura Coitiño; DONALD G. TRUHLAR

Cinética (VTST) de Procesos de Interés Atmosférico: Abstracción de H en Hidrocarburos Alifáticos por Reacción con Radicales OH. , 1996

*Evento:* Internacional , XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Cáceres, España. , 1996

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

E. Laura Coitiño; L. LUCCHINI

Cationes Radicales Derivados de Complejos  $\text{CH}_2=\text{CHOH}\dots\text{OHR}$  y  $\text{CH}_2=\text{CHOH}\dots\text{O}=\text{CHR}$ : Un Estudio con Métodos Ab Initio y Funcionales de la Densidad B3LYP , 1996

*Evento:* Internacional , XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Cáceres, España. , 1996

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

E. Laura Coitiño; M. L. CUBAS; OSCAR N. VENTURA

Caracterización de la Hiperficie de Energía Potencial (PES) para los sistemas  $\text{H}_2\text{CO}\dots\text{NH}_3$  Neutro y Cation Radical. , 1996

*Evento:* Internacional , XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Cáceres, España. , 1996

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

DONALD G. TRUHLAR; Y.-Y. CHUANG.; E. Laura Coitiño; W.-P. HU; S. CLAYTON; R. STECKLER

Improved Methods for Direct Dynamics Calculations of Organic Reactions , 1996

*Evento:* Internacional , Symposium on Organic Reactions by Ab initio Methods, 212th National American Chemical Society Meeting. , Orlando, FL, USA , 1996

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

E. Laura Coitiño; DONALD G. TRUHLAR

Correlated Ab Initio Calculations on the Transition State Structure, Barrier Height and Vibrational Frequencies for the Reaction  $\text{C}_2\text{H}_6 + \text{OH} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5 + \text{H}_2\text{O}$  , 1996

*Evento:* Internacional , 8th Annual Conference on New Methods in Electronic Structure Calculations , Minneapolis, USA , 1996

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño; DONALD G. TRUHLAR

Dual Level Reaction-Path Dynamic Calculations on the  $C_2H_6 + OH \rightarrow C_2H_5 + H_2O$  Reaction , 1996

*Evento:* Internacional , 2nd Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics , New Orleans, USA , 1996

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Química Atmosférica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño; E. CIUFFARIN; FRANCA M. FLORIS; JACOPO TOMASI

Degenerate Lithium-Hydrogen Exchange Reactions: An Alternative Mechanism for Metalation of  $CH_4$  , 1996

*Evento:* Internacional , 2nd Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics , New Orleans, USA , 1996

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño; JACOPO TOMASI; OSCAR N. VENTURA

Rol Activo del Solvente en la hidratación del glicoxal en solución acida acuosa. , 1995

*Evento:* Internacional , XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. QUITEL XXII. , Pucón, Chile , 1995

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño; ALBERTO PEREIRA; OSCAR N. VENTURA

Ab Initio Study of the Structure of Radical Cations derived from H-Bonded Complexes: A Comparison between  $[H_2CO-H_2O]^+$  and  $[H_2CO-HF]^+$  , 1994

*Evento:* Internacional , 1st European Conference on Computational Chemistry. , Nancy, Francia. , 1994

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño; JACOPO TOMASI; OSCAR N. VENTURA

Mechanism of the Acid-Catalyzed Hydration of Glyoxal in Aqueous Solution: An Ab Initio Study , 1994

*Evento:* Internacional , 8th International Congress of Quantum Chemistry , Praga, República Checa , 1994

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño; M. SOLÁ; M. DURÁN; OSCAR N. VENTURA

Transition States for Hydrogen Abstraction in  $[H_2CO-H_2O]^+$  Complexes. How reliable is UMP2? , 1994

*Evento:* Internacional , 8th International Congress of Quantum Chemistry , Praga, República Checa , 1994

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño; JACOPO TOMASI

Theoretical Study of the Internal Rotation in Neutral and Protonated Glyoxal: from Gas Phase to Aqueous Solution. , 1994

*Evento:* Internacional , 1st European Conference on Computational Chemistry. , Nancy, Francia. , 1994

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño; JACOPO TOMASI; ROBERTO CAMMI

Estensioni del modello del Continuo Polarizzabile (PCM): Algoritmi alternativi per la determinazione delle cariche superficiali apparenti , 1994

*Evento:* Nacional , 2do Convegno Nazionale di Informatica Chimica , Bologna, Italia. , 1994

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, desarrollo PCM

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

R. BONACCORSI; ROBERTO CAMMI; E. Laura Coitiño; M. COSSI; FRANCA M. FLORIS; B. MENNUCCI; M. PERSICO; A. TANI; JACOPO TOMASI

Solvente: Programmi per lo studio dei processi chimici in soluzione con il metodo degli Hamiltoniani efficaci con distribuzione continua del solvente (EHCD). , 1994

*Evento:* Nacional , 2do Convegno Nazionale di Informatica Chimica , Bologna, Italia. , 1994

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, desarrollo PCM

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño; JACOPO TOMASI; OSCAR N. VENTURA

Importance of Water in Aldol Condensation Reactions of Acetaldehyde , 1993

*Evento:* Internacional , Faraday Symposium N°29: Potential-energy Surfaces and Organic Reaction Paths , Oxford, Gran Bretaña , 1993

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, mecanismos de aldehídos

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. Laura Coitiño; JACOPO TOMASI

Analisi della influenza del solvente in reazioni coinvolgenti il gruppo aldeidico usando metodi teorici , 1993

*Evento:* Nacional , Seminario Nazionale di Chimica Fisica 1993. , Torino, Italia , 1993

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, mecanismos de aldehídos

*Medio de divulgación:* Papel;

Conferencia seleccionada

Resumen

E. Laura Coitiño; JACOPO TOMASI; ROBERTO CAMMI

Evaluación de las cargas aparentes de polarización del solvente en modelos de cavidad: una nueva formulación , 1993

*Evento:* Internacional , XXI CHITEL- Congres des Chimistes Theoriciens d'Expression Latine , Grenoble, Francia , 1993

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, mecanismos de aldehídos

*Medio de divulgación:* Papel;



#### Resumen

E. Laura Coitiño; JACOPO TOMASI; OSCAR N. VENTURA

Estudio ab initio del mecanismo de la hidratación ácida del glicoxal en disolución acuosa. , 1993

*Evento:* Internacional , XXI CHITEL- Congres des Chimistes Theoriciens d'Expression Latine , Grenoble, Francia , 1993

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, mecanismos de aldehídos

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

E. Laura Coitiño; JACOPO TOMASI; OSCAR N. VENTURA

Application of Microscopic (discrete) and Macroscopic (continuum) Models to the Study of Hydration Reaction of Glyoxals in Aqueous Solution. , 1993

*Evento:* Internacional , Xth International Workshop Horizons in Hydrogen Bond Research , Autrans, Francia , 1993

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, mecanismos de aldehídos

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

E. Laura Coitiño; ALBERTO PEREIRA; OSCAR N. VENTURA

In Search of a Hydrogen-Bonded Distonic Radical Cation: the Formaldehyde-Water Complex , 1993

*Evento:* Internacional , 1st Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics. , Girona, España , 1993

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, cationes radicales

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

E. Laura Coitiño; JACOPO TOMASI; ROBERTO CAMMI

A Comparison of Different Methods for the Calculation of Surface Cavity Charges in the Ab Initio Continuum Model of the Solvent. , 1993

*Evento:* Internacional , 1st Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics. , Girona, España , 1993

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, desarrollo PCM

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

E. Laura Coitiño; OSCAR N. VENTURA; JACOPO TOMASI

Estudio ab initio de la reacción de hidratación de 2-oxoaldehídos. , 1992

*Evento:* Internacional , XX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. XX QUITEL , Mérida, Venezuela , 1992

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, mecanismos de aldehídos

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

ALBERTO PEREIRA; E. Laura Coitiño; OSCAR N. VENTURA

Cálculo Ab Initio de cationes radicales derivados de complejos de enlace de hidrógeno: comparación de los dímeros CH<sub>2</sub>O-HF y CH<sub>2</sub>O-H<sub>2</sub>O. , 1992

*Evento:* Internacional , XX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. XX QUITEL , Mérida, Venezuela , 1992

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, cationes radicales

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

E. Laura Coitiño; JACOPO TOMASI; OSCAR N. VENTURA

Static effects of the solvent on reactions involving transformations of aldehyde groups: hydration of glyoxals. , 1992

*Evento:* Internacional , European Research Conference , San feliu de Guixols, España , 1992

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, mecanismos de aldehídos

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

E. Laura Coitiño; OSCAR N. VENTURA; RAMÓN SERRA; AGUSTÍ LLEDÓS; JOAN BERTRÁN

Estructura y reactividad de radicales formados en espectroscopía REMPI de complejos formaldehído-agua , 1990

*Evento:* Internacional , XIX Congreso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Espressione Latina. , Roma, Italia , 1990

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, cationes radicales

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

E. Laura Coitiño; OSCAR N. VENTURA; RAMÓN M. SOSA

Precisión de métodos semiempíricos en la determinación de la estructura de complejos de enlace de hidrógeno entre agua y amoníaco. , 1990

*Evento:* Internacional , XIX Congreso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Espressione Latina. , Roma, Italia , 1990

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, complejos enlace de hidrógeno

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

E. Laura Coitiño; OSCAR N. VENTURA

Estudio Semiempírico del Efecto del Agua Sobre las Reacciones de Hidratación y Enolización del Acetaldehído , 1989

*Evento:* Internacional , 5o Simposio Brasileiro de Química Teórica. , Caxambú, Brasil , 1989

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, mecanismos aldehídos

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

M. L. CUBAS; E. Laura Coitiño; OSCAR N. VENTURA

Cálculos MM2 y MNDO-PM3 en derivados glutatiónicos del metilglioxal , 1989

*Evento:* Internacional , 5o Simposio Brasileiro de Química Teórica. , Caxambú, Brasil , 1989

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, aductos metilglioxal-glutatión

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

E. Laura Coitiño; OSCAR N. VENTURA; RAMÓN M. SOSA

Test de Métodos Semiempíricos en Cálculos de Complejos de Enlace de Hidrógeno: dímeros de agua y amoníaco. , 1989

*Evento:* Internacional , 5o Simposio Brasileiro de Química Teórica. , Caxambú, Brasil , 1989

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, complejos enlace de hidrógeno

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

E. Laura Coitiño; KENNETH IRVING; JOSÉ RAMA; OSCAR N. VENTURA

Estudio Teórico de Complejos de Enlace de Hidrógeno Usando Métodos Semiempíricos. , 1989

*Evento:* Internacional , XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , La Plata, Argentina , 1989

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Comput., complejos enlace de hidróg., test semiempíricos

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

OSCAR N. VENTURA; E. Laura Coitiño; AGUSTÍ LLEDÓS; JOAN BERTRÁN

Estudio Comparativo de Cálculos AM1, MNDO/M y Ab Initio en la Reacción de Hidratación del Formaldehído. , 1989

*Evento:* Internacional , XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , La Plata, Argentina , 1989

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Comput., reacción aldehídos., test semiempíricos

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

KENNETH IRVING; E. Laura Coitiño; A. IGLESIAS; OSCAR N. VENTURA; AGUSTÍ LLEDÓS

Comparación de Resultados Semiempíricos y Post-Hartree-Fock (Corregidos por BSSE) en el Estudio de la Reacción de Adición Directa de Agua a Formaldehído. , 1989

*Evento:* Internacional , XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , La Plata, Argentina , 1989

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Comput., comparación metodológica

*Medio de divulgación:* Papel;

## Producción técnica

### Productos

Software , Otra

E. Laura Coitiño

POLYRATE 2015: Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics , Programa para cálculo de cinética de procesos químicos por dinámica directa semiclásica con efecto túnel , 2015

*Aplicación:* SI , Modelado de procesos para la industria

*Institución financiadora:* Universidad de Minnesota, Minneapolis, USA

*Palabras clave:* Cinética Química; Dinámica directa ; Efecto túnel

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*Medio de divulgación:* Internet; *Disponibilidad:* Restringida; *Ciudad:* /Estados Unidos

<http://comp.chem.umn.edu/polyrate/>

February 1, 2015 POLYRATE 2015: Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics Jingjing Zheng, Shuxia Zhang, Benjamin J. Lynch, José C. Corchado, Yao-Yuan Chuang, Patton L. Fast, Wei-Ping Hu, Yi-Ping Liu, Gillian C. Lynch, Kiet A. Nguyen, Charles F. Jackels, Antonio Fernandez Ramos, Benjamin A. Ellingson, Vasilios S. Melissas, Jordi Villà, Ivan Rossi, Elena. L. Coitiño, Jingzhi Pu, Titus V. Albu Department of Chemistry and Supercomputing Institute University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota 55455 Artur Ratkiewicz Institute of Chemistry, University of Bialystok, Poland Rozeanne Steckler Northwest Alliance for Computational Science & Engineering Oregon State University, Corvallis, Oregon 97331 Bruce C. Garrett Environmental Molecular Sciences Laboratory Pacific Northwest Laboratory Richland, Washington 99352 Alan D. Isaacson Department of Chemistry and Biochemistry Miami University Oxford, Ohio 45056 and Donald G. Truhlar Department of Chemistry and Supercomputing Institute University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota 55455 POLYRATE status: Most recent version: 2015 Date of most recent version: January 28, 2015 Date of most recent manual update: January 28, 2015

Software , Otra

E. Laura Coitiño

GAUSSRATE 2015 , 2015

*Aplicación:* SI

*Palabras clave:* Polyrate-Gaussian Interface

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*Medio de divulgación:* Internet; *Disponibilidad:* Restringida; *Ciudad:* /Estados Unidos

Jingjing Zheng, Shuxia Zhang, José C. Corchado, Yao-Yuan Chuang, Elena L. Coitiño, Benjamin A. Ellingson, and Donald G. Truhlar

Software , Otra

JZ; E. Laura Coitiño; ROZEEANNE STECKLER; BCG; ADI; DONALD G. TRUHLAR

POLYRATE 2010-A , Paquete para cálculo de cinética de reacciones químicas , 2010

*Aplicación:* SI , Predicción de la química de combustión en aplicaciones a la industria de automóviles, aeroespacial y electrónica

*Institución financiadora:* U. S. Department of Energy, Office of Basic Energy Sciences, Universidad de Minnesota

*Palabras clave:* modelado cinética VTST

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Cinética Química

*Medio de divulgación:* Internet; *Disponibilidad:* Restringida; *Ciudad:* /Estados Unidos

<http://comp.chem.umn.edu/polyrate/>

POLYRATE 2010-A: Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics Jingjing Zheng, Shuxia Zhang, Benjamin J. Lynch, José C. Corchado, Yao-Yuan Chuang, Patton L. Fast, Wei-Ping Hu, Yi-Ping Liu, Gillian C. Lynch, Kiet A. Nguyen, Charles F. Jackels, Antonio Fernandez Ramos, Benjamin A. Ellingson, Vasilios S. Melissas, Jordi Villà, Ivan Rossi, Elena. L. Coitiño, Jingzhi Pu, Titus V. Albu Department of Chemistry and Supercomputing Institute University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota 55455 Rozeanne Steckler Northwest Alliance for Computational Science & Engineering Oregon State University, Corvallis, Oregon 97331 Bruce C. Garrett Environmental Molecular Sciences Laboratory Pacific Northwest Laboratory Richland, Washington 99352 Alan D. Isaacson Department of Chemistry and Biochemistry Miami University Oxford, Ohio 45056 and Donald G. Truhlar Department of Chemistry and Supercomputing Institute University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota 55455 To obtain POLYRATE: The POLYRATE package is available for downloading (Web access only) through Donald G. Truhlar at the University of Minnesota. To obtain POLYRATE from Minnesota, print, fill out, and sign the license below and either fax it to him at 612-626-9390 or scan it and send it as an e-mail attachment to [software@comp.chem.umn.edu](mailto:software@comp.chem.umn.edu). You will then receive the password required for downloading by email. POLYRATE distribution at Minnesota is currently being handled by Software Manager. POLYRATE 2010-A is not reverse compatible with all previous versions of the interface programs. New versions of these programs will be released. Earlier versions of the code that are still used in some derived codes are also available, in particular:

Software , Otra

J. ZHENG; SHUXIA ZHANG; JOSÉ C. CORCHADO; YAO-YUAN CHUANG; E. Laura Coitiño; BENJAMIN A. ELLINGSON; DONALD G. TRUHLAR

GAUSSRATE 2009-A (Version 2009-A/P2008-G09G03G98G94, Mayo 2010) , Interfase entre los paquetes Polyrate 2008 y Gaussian09 para correr cinética por dinámica directa , 2010

*Aplicación:* SI , estudios de cinética de procesos de combustión y en sistemas de interés biológico

*Institución financiadora:* University of Minnesota

*Palabras clave:* software para cinética VTST

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Cinética Química

*Medio de divulgación:* Internet; *Disponibilidad:* Restringida; *Ciudad:* /Estados Unidos

<http://comp.chem.umn.edu/gaussrate/>

GAUSSRATE 2009-A Jingjing Zheng, Shuxia Zhang, José C. Corchado, Yao-Yuan Chuang, Elena L. Coitiño, Benjamin A. Ellingson, and Donald G. Truhlar Department of Chemistry and Supercomputing Institute, University of Minnesota, Minneapolis, MN 55455-0431, USA To obtain GAUSSRATE: The GAUSSRATE package is available for downloading (Web access only) through Donald G. Truhlar at the University of Minnesota. To obtain GAUSSRATE from Minnesota, please fill out the online license form at the link below. You will then receive the password required for downloading by email. GAUSSRATE distribution at Minnesota is currently being handled by Software Manager. GAUSSRATE-version 2009-A user or group license form GAUSSRATE-version 2009-A site license form Download GAUSSRATE-version 2009-A

Software , Otra

E. Laura Coitiño; DONALD G. TRUHLAR

Polyrate 9.7 , Paquete para cálculo de cinética de reacciones químicas , 2007

*Aplicación:* SI , Industria

*Institución financiadora:* University of Minnesota

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Cinética Química

*Medio de divulgación:* Internet; *Disponibilidad:* Restringida; *Ciudad:* /Estados Unidos

<http://comp.chem.umn.edu/polyrate/>

Software , Otra

MOLLI NOLAND; E. Laura Coitiño; YAO-YUAN CHUANG; DONALD G. TRUHLAR

DDUtilities , 1999

*Aplicación:* NO

*Institución financiadora:* University of Minnesota

*Palabras clave:* Utilidades de apoyo a Polyrate

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Cinética Química

*Medio de divulgación:* Internet; *Ciudad:* /Uruguay

<http://comp.chem.umn.edu/ddutil/>

anuary 1999 DDUTILITIES 1.1/P7.0-G94 Program Date: April 7, 1997 Manual Date: January 20, 1999 by Molli Noland, Elena Laura Coitino, Yao-Yuan Chuang, and Donald G. Truhlar Department of Chemistry and Supercomputing Institute, University of Minnesota, Minneapolis, MN 55455-0431

Software , Otra

JOSÉ C. CORCHADO; E. Laura Coitiño; YAO-YUAN CHUANG; DONALD G. TRUHLAR

GAUSSRATE versions 7.2-7.3 , (An interface for running Direct Dynamics Calculations Using Modular versions of POLYRATE and GAUSSIAN94 Codes , 1997

*Aplicación:* NO

*Institución financiadora:* University of Minnesota

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Internet; *Disponibilidad:* Restringida; *Ciudad:* /Estados Unidos

<http://comp.chem.umn.edu/WWW/GAUSSRATE/GAUSSRATE.html>

Software , Otra

DONALD G. TRUHLAR; E. Laura Coitiño

POLYRATE versions 7.0-9.1 (A Program for Calculating Variational Transition State Theory Chemical Rates with Semiclassical Tunneling). , Mejoras al programa de cálculo principal para el uso de la teoría variacional del estado de transición , 1996

*Aplicación:* SI

*Institución financiadora:* University of Minnesota

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Internet; *Disponibilidad:* Restringida; *Ciudad:* /Estados Unidos

<http://comp.chem.umn.edu/WWW/POLYRATE/POLYRATE.html>

El número de autores es extenso. Mis aportes arrancan en el año 1996, durante la estancia postdoctoral en el grupo del Prof. D.G. Truhlar en la Universidad de Minnesota.

Software , Otra

E. Laura Coitiño; ROSSANA BONACCORSI; ROBERTO CAMMI

Programa MGPIA94 , Incorporación de nuevas extensiones del modelo PCM del Solvente al programa MONSTERGAUSS87 , 1994

*Aplicación:* SI

*Institución financiadora:* CEE y Universidad de Pisa

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Disquetes; *Disponibilidad:* Restringida; *Ciudad:* /Italia

No disponible

## Otros

Cursos de corta duración dictados

Especialización

Data Mining en Quimi y Bioinformática , 2007

Uruguay , Español , Papel

*Tipo de participación:* Organizador, *Unidad:* Facultad de Ciencias , *Duración:* 2 semanas

Facultad de Ciencias , Montevideo

*Institución Promotora/Financiadora:* Facultad de Ciencias

*Palabras clave:* Químico y Bioinformática; Minería de Datos; Procesamiento de información bioquímica

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Quimiinformática/Bioinformática/Minería de Datos

Cursos de corta duración dictados

Especialización

Bioinformática Estructural: Visualización y diseño asistido por PC de la estructura 3D de moléculas y macromoléculas , 2002

Uruguay , Español , Papel , <http://lqtc.fcien.edu.uy/>

*Tipo de participación:* Organizador, *Unidad:* Laboratorio de Química Teórica y Computacional, *Duración:* 2 semanas

Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Liceo 1 de Trinidad , Montevideo e interior semipresencial

*Institución Promotora/Financiadora:* Facultad de Ciencias, Universidad de la República

*Palabras clave:* bioinformática estructural; visualización molecular

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / bioinformática estructural

*Información adicional:* El curso se ha dado desde el año 2002 en adelante hasta 2007, dirigido esencialmente a profesores de secundaria y universidad, contando con el equipo docente del LQTC en Facultad de Ciencias, y ex-colaboradores. En el corriente año se está confluendo con otra iniciativa planteada en Facultad de Ciencias por la Dra. Adriana Estevez, de la Sección Bioquímica

Desarrollo de material didáctico o de instrucción

Química de la Atmósfera y Polución , 2003

Uruguay , Español , CD-Rom

Libro de texto en producción. Caps 1-4, 210 pp.

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente / Meteorología y Ciencias Atmosféricas / Química de la atmósfera limpia y contaminada

*Información adicional:* El libro fue desarrollado inicialmente para su uso en soporte CD y acceso a través de Internet para el curso homónimo de posgrado, recibiendo apoyo parcial de la Comisión Sectorial de Educación Permanente (2001). Entre 2002-2003 se trabajó en su elaboración en formato impreso, disponiéndose en forma final de los primeros 4 capítulos (210 pp.), y restando culminar los 2 últimos. Este trabajo quedó trunco en 2004 a raíz de atravesar serios problemas de salud, pero se pretende concluir en algún momento.

[Organización de eventos](#)

[Congreso / Organización](#)

[XXXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , 2002](#)

[Uruguay , Español , Internet](#)

*Duración:* 1 semanas

*Evento itinerante:* SI,

[Radisson Victoria Plaza , Montevideo](#)

*Institución Promotora/Financiadora:* [Asociación Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina](#)

*Áreas del conocimiento:* [Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional](#)

*Información adicional:* [Organización del evento - Miembro del comité organizador](#)

## Evaluaciones

Evaluación de Proyectos

2011 / 2011

*Institución financiadora:* Programa MARCA - MERCOSUR

*Cantidad:* De 5 a 20

Programa MARCA - MERCOSUR , Uruguay

Evaluación de proyectos nacionales (Uruguay) del programa MARCA 2011

## Evaluación de Proyectos

2010 / 2010

*Institución financiadora:* CSE-UdelaR

*Cantidad:* Menos de 5

CSE-UdelaR , Uruguay

Evaluación de propuestas de Facultad de Ciencias para varias convocatorias de CSE con presentación de proyecto institucional.

## Evaluación de Proyectos

2006

*Institución financiadora:* CONICYT

*Cantidad:* Menos de 5

CONICYT , Uruguay

Evaluación de Perfiles y Proyectos para la convocatoria del CONICYT del año 2006 en el área Básica

## Evaluación de Proyectos

2006 / 2006

*Institución financiadora:* CSIC

*Cantidad:* De 5 a 20

CSIC , Uruguay

Integrante de la Comisión Evaluadora del Área Básica - Convocatoria a Proyectos I+D y de iniciación a la investigación 2006.

## Evaluación de Eventos

2017

*Nombre:* XLIII Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression - CHITEL 2017,

Sorbonne Universités, CNRS, Francia

Como miembro del Comité Científico internacional participé en la propuesta y selección de keynote speakers del congreso.

## Evaluación de Eventos

2015 / 2016

*Nombre:* 42do Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina - Organizadora, Co-Chair evento,

UdelaR, IPMON

Nos encontramos trabajando en la organización del evento actualmetne (enero 2016). Integro el Comité Organizador, como co-chair, con responsabilidad en la selección de conferencistas invitados y el programa general de actividades científicas.

## Evaluación de Eventos

2014 / 2015

*Nombre:* Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology - Salto, Organizadora, Chair de sesión, evaluadora trabajos,

UdelaR, IPMON, ANII, IUPAB, SBFuy, SAF

Integré el comité organizador del evento desde su inicio, participando en el diseño del programa, selección de conferencistas, chair de sesión y evaluación de trabajos presentados en formato poster.

## Evaluación de Eventos

2013

*Nombre:* 2das Jornadas +Biofísica - congreso nacional de la seccional SBF.uy - Montevideo, 2013 - chair de sesión, evaluadora de trabajos,

UdelaR, IPMON

Actué como chair de sesión en Biofísica Computacional, seleccionando las conferencias orales invitadas (PProf. Dr. Ma. Joao Ramos) y trabajos orales seleccionados. Evalué posters de estudiantes en una sesión para otorgar el premio al mejor trabajo del congreso

## Evaluación de Eventos

2012

*Nombre:* 38vo Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina - Quitel 2012 - Natal, Brasil,

Universidad Federal

Evalué trabajos contribuidos en formato poster para la asignación del premio al mejor trabajo (2 sesiones).

Evaluación de Eventos

2001 / 2002

*Nombre:* 28vo Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina - Montevideo 2002,

UdelaR

Integré el Comité Organizador, participé en la definición del programa y selección de conferencias invitadas y contribuidas.

Evaluación de Publicaciones

2017

*Nombre:* Parasitology Research,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de trabajos de modelado molecular (dinámica molecular) de proteínas relevantes a parasitosis

Evaluación de Publicaciones

2015

*Nombre:* Journal of Molecular Graphics and Modelling,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2012 / 2015

*Nombre:* Biochemistry - American Chemical Society,

*Cantidad:* Menos de 5

Referato de artículos completos

Evaluación de Publicaciones

2010 / 2017

*Nombre:* Journal of Molecular Modeling,

*Cantidad:* De 5 a 20

Referato de trabajos completos. Integrada como Editora Asociada de la Revista en diciembre 2016

Evaluación de Publicaciones

2010 / 2011

*Nombre:* European Journal of Medicinal Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2007 / 2013

*Nombre:* Journal of Organic Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

1997 / 2007

*Nombre:* Journal of Physical Chemistry,

*Cantidad:* De 5 a 20

Evaluación de Publicaciones

1997 / 1997

*Nombre:* Journal of the American Chemical Society,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

1992 / 1992

*Nombre:* Gazzeta Chimica Italiana,

*Cantidad:* Menos de 5

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores



## Formación de RRHH

### Tutorías concluidas

#### Posgrado

##### Tesis de maestría

“Estudio teórico-experimental de la glicación temprana en Histona H1 y ADN por ribosas y metilgloxal y la sinergia con su oxidación”- Becas ANII y CAP Maestría 2016-2018 , 2016

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Lic. Florencia Klein

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Magister en Química

*Palabras clave:* Glicación; Histona H1- ADN; metilgloxal; sinergia glicación-oxidación; ribosa

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* El Proyecto de Plan de Estudios y Tesis de Klein fue aprobado por el Consejo de Facultad de Química el 18/06/15, actuando quien escribe como Directora Académica y de Tesis única en el Laboratorio de Química Teórica y Computacional de Facultad de Ciencias. La estudiante reunió durante el primer año buena parte de los créditos de cursos (37/50) siendo apoyada económicamente para cursar en la UBA y destinando tiempo de su contrato en el LQTC a avanzar en sus estudios. Desarrolló investigación inicial del plan generando resultados originales para sostener una presentación en reunión latinoamericana de nov. 2015 a la que no asistió (el poster fue llevado por su tutora). Postuló con el tema de su tesis por apoyo CSIC Iniciación 2015, proyecto aprobado académicamente sin financiar (CSIC financió en la misma convocatoria proyecto de otra estudiante de doctorado bajo mi orientación) y postuló y obtuvo becas 2016-2018 de Maestría ANII (dic.2015) y Maestría CAP-UdelaR (marzo 2016), siendo admitida como estudiante de posgrado del PEDECIBA-Química en octubre 2015. Los estudios fueron interrumpidos por la estudiante en marzo 2016 sin preaviso, al obtener un contrato en el Instituto Pasteur que le exigiera iniciar un posgrado diferente con el Dr. Sergio Pantano. Se le propuso terminar rápidamente sus compromisos previos, defendiendo la Maestría y aprovechando las becas obtenidas, antes de vincularse a un nuevo posgrado, pero tras realizar ese acuerdo hizo abandono de todas las actividades, por lo que formalmente se dio por cerrada la experiencia en mayo 2016.

##### Tesis de doctorado

“Estudio molecular del gen de la enfermedad de von Hippel-Lindau (VHL): detección de portadores y caracterización funcional de nuevas variantes génicas” - Estudio in silico de complejos pVHL (WT y mutantes) , 2016

*Tipo de orientación:* Asesor/Orientador

*Nombre del orientado:* M.Sc. Cecilia Mathó

Facultad de Farmacia y Bioquímica, Universidad de Buenos Aires , Argentina , Doctorado en Bioquímica

*Palabras clave:* complejo multiproteico VBC-HIF; mutaciones in silico de pVHL; Enfermedad de von Hippel-Lindau; simulaciones MD y MMPB(GB)SA

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica y Biofísica

Computacional

Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Clínica / Endocrinología y Metabolismo

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Argentina/Español

<http://www.cedie-conicet.gob.ar/matho-cecilia/>

*Información adicional:* Actividad desarrollada bajo mi supervisión científica en el LQTC-IQB-FC-UdelaR entre 2011 y 2015, encuadrada en el Doctorado en Bioquímica desarrollado en Argentina por la M.Sc. Mathó (tutoras de tesis: Dra. Patricia Pennisi y Gabriela Sansó, CEDIE-CONICET) colaborò además la Dra. A. Merlino del LQTC. La actividad respondió a la solicitud que me planteó en 2011 la M.Sc. Mathó de adquirir entrenamiento y realizar estudios in silico del efecto de mutaciones de la proteína pVHL (enfermedad de von Hippel-Lindau) que segregan con el fenotipo de la enfermedad que caracterizó funcionalmente en su tesis sobre la capacidad de reconocimiento de la proteína HIFalfa en complejos VBC. El diseño del trabajo estuvo en mis manos y la Dra. Merlino del LQTC apoyó en la producción de resultados. A partir de 2013 se incorporó formalmente esta colaboración al plan de doctorado de la M.Sc. Mathó y se incluyeron los resultados in silico como una parte significativa de su tesis, defendida en la UBA, Facultad de Farmacia y Bioquímica el 07/07/2016, con calificación de Sobresaliente 10/10.

#### Tesis de maestría

Peroxirredoxinas: eficientes reductoras de peróxidos, eficientemente reducidas por tioredoxinas. Función de los aminoácidos conservados en la especificidad de ambas reacciones.(con beca CAP 2013-2015) , 2015

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Lic. Stephanie Portillo

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Magister en Química

*Palabras clave:* oxidación de tioles; reactividad en enzimas; modelado QM/MM y MD de proteínas

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* La estudiante fue aceptada en el Posgrado en Química en mayo 2013, iniciando como candidata a Maestría. Se designó en mayo 2015 tribunal para su defensa oral de pasaje a Doctorado en Química (Ventura, Salinas, Giacomini). Actúo como Directora Académica del Posgrado y comparto con el Dr. Gerardo Ferrer-Sueta la dirección de la tesis, siendo éste último responsable de orientar la componente experimental de la misma y quien escribe la de modelado.

#### Tesis de doctorado

Respuestas asociadas al déficit hídrico en leguminosas :acumulación de prolina y estrés nitro-oxidativo , 2014

*Tipo de orientación:* Asesor/Orientador

*Nombre del orientado:* Lic. Santiago Signorelli

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Ciencias Biológicas (UDELAR-PEDECIBA)

*Palabras clave:* Prolina en estrés vegetal; Mecanismo de captura de radicales OH; Modelado computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Internet, *País/Idioma:* Uruguay/Español

<https://www.colibri.udelar.edu.uy/handle/123456789/6461>

*Información adicional:* Orienté entre 2011 y 2014 el trabajo de investigación del Lic. Signorelli de modelado computacional del mecanismo de reacciones del radical hidroxilo con prolina, cuyos resultados fueron incorporados a la Tesis Doctoral del mismo, defendida en Facultad de Ciencias en febrero 2015. Las actividades de modelado computacional, que dieron sustento a dos artículos publicados en 2014 y 2015 fueron diseñadas por mi junto al estudiante de posgrado y desarrolladas en una primera fase como pasantía en el LQTC, haciendo uso de los recursos materiales (software Gaussian09/Gaussview y y equipamiento de cálculo) en nuestras instalaciones en 2011. A partir de 2012 ayudé al estudiante a ganar autonomía en el trabajo, en la adquisición por su proyecto ANII de un servidor de cálculo que configuré y en el que instalé y le facilité copia de nuestro software científico, sobre el cual continuó la producción entre 2012 y 2014 en Facultad de Agronomía, siempre bajo mi orientación y realizando todo el análisis e interpretación de los resultados mecanísticos junto a quien escribe. Los Directores de Tesis fueron los Dres. Jorge Monza, Omar Borsani y Javier Corpas, especialistas en la componente biológica.

#### Tesis de maestría

Estudio experimental y modelado computacional de propiedades del tiol de la Albúmina Sérica Humana y sus derivados (beca ANII: POS\_2011\_1\_3287 desde 01/03/2012)) , 2013

*Tipo de orientación:* Cotutor en pie de igualdad

*Nombre del orientado:* Lic. Jenner Bonanata

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Palabras clave:* Modelado de la reactividad de tioles en proteínas; integración enfoques teórico-experimental; albumina y sus transformaciones; Espectros FTIR

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica redox de tioles en proteínas

Química Teórica y Computacional

tiolos en proteínas

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Se comparte la tutoría de la tesis (que integra una componente central de trabajo de modelado computacional, área en la que quien suscribe viene formando y orientando al Lic. Bonanata desde el pregrado y en beca de iniciación de la ANII, con trabajo experimental) en pie de igualdad con la Dra. Beatriz Alvarez del Laboratorio de Enzimología, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias. El estudiante ha recibido beca de posgrado nacional por el período marzo 2012-marzo 2014. concretó con éxito la defensa oral del pasaje a doctorado el 19/01/13.

Tesis de doctorado

Modelado de las características estructurales y mecanismo de acción molecular de compuestos de Pd(II) y Pt(II) con potencial acción antineoplásica , 2008

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Pablo Dans

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Palabras clave:* Modelado Computacional de Sistemas Químicos; Anticancerígenos de Pt(II)

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Nov. 2001 - Nov. 2005 - Trabajo de producción de la tesis de posgrado. Set. 2005 - Admisión formal al doctorado (tribunal Ventura, Manta, Kremer) Marzo 2007 - Se recibe una primera versión completa del documento de tesis. Agosto 2007 - Se envía el documento de tesis en versión final corregida y avalada a la Comisión de Posgrado de Facultad de Química. La designación de tribunal para defensa queda en suspenso hasta que el estudiante apruebe varios exámenes pendientes de su plan de estudios, situación que concreta a octubre de 2008. 12/12/08 - Defensa final. Tribunal: Ventura, Cerecetto, Estrín. Excelente. Marzo 2009 - Homologación del fallo por el Consejo de Facultad de Química

**Tesis de maestría**

**Modelado de las características estructurales y mecanismo de acción molecular de compuestos de Pd(II) y Pt(II) con potencial acción antineoplásica , 2003**

*Tipo de orientación:* **Tutor único o principal**

*Nombre del orientado:* **Pablo Dans**

**Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)**

*Palabras clave:* **Compuestos cuadrado planos de Pt(II)/Pd(II)**

*Áreas del conocimiento:* **Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / diseño y optimización de fármacos in silico**

*Medio de divulgación:* **Papel, País/Idioma: Uruguay/Español**

*Información adicional:* **Culminados todos los cursos, actividades curriculares y trabajo de tesis planificado, el estudiante hizo su presentación oral previa a la defensa (tribunal Ventura, Coitiño, Cerecetto, Calificación 12/12) en octubre 2003. En lugar de presentar el documento de tesis, solicitó pasaje al nuevo régimen de posgrado, validando los 5 semestres de estudios realizados como la primera parte de sus estudios. Su propuesta fue aceptada en diciembre 2004 y la admisión al nivel Doctoral tuvo lugar en agosto 2005 (tribunal Kremer, Manta, Ventura).**

Tesis de maestría

Modelado de los procesos de combustión del metanol como combustible limpio para el ambiente , 1999

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Leonidas Carrasco

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Palabras clave:* modelado de procesos de combustión

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Orgánica

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* El candidato cubrió sólo 2 de 4 semestres de actividades curriculares previstos en su plan de estudios, desde marzo 1998 a marzo 1999. Tomó los cursos complementarios del primer semestre de su plan de estudios (que fueron ofrecidos y sostenidos en su totalidad por su orientadora en 1998) y abandonó los estudios sin dar aviso luego de no obtener una beca del PEDECIBA y no lograr aprobar las actividades curriculares cursadas (algo necesario para cumplir las preinscripciones de las finales). Los avances del trabajo de investigación de la tesis fueron presentados por su orientadora en un congreso internacional en Puebla, México, en setiembre 1998. Se informó al Consejo Científico del PEDECIBA y a la Comisión de Magister y Doctorado de la situación, formalizando su cierre con claridad en marzo 1999.

## Grado

Tesis/Monografía de grado

Aportando piezas clave para entender el mecanismo de apertura de la glucopiranososa en seroalbúmina humana camino a su glicación en Lys195 , 2016

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Federico Ortiz Astigarraga

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Bioquímica

*Palabras clave:* Glicación; Albúmina Sérica humana; Glucosa, apertura; Modelado computacional; Diabetes

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular / Modificación post-traducción de proteínas séricas

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Mecanismos básicos y efectos de la glicación de proteínas por glucosa asociados a diabetes. Co-tutor del trabajo: Lic. Jenner Bonanata. Tesina concluida y presentada formalmente, en etapa de evaluación externa.

**Tesis/Monografía de grado**

Estudio de la glicación temprana de Histona H1 como posible blanco para la inhibición por fármacos y marcador para diagnóstico en patologías humanas , 2015

*Nombre del orientado:* Florencia Klein

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Bioquímica

*Palabras clave:* Glicación; histona H1 linker; blancos farmacológicos-identificación

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica, Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Tutora única. Concluida en marzo 2015. En evaluación

**Tesis/Monografía de grado**

Interacciones entre el ácido araquidónico y el receptor nuclear PPARgamma: caracterización por modelado computacional y monitoreo de genes reporteros , 2014

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Victoria Veroli

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Bioquímica

*Palabras clave:* ácidos grasos nitrados; Modelado computacional; interacción con PPAR gamma

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Inmunoensayos

*Medio de divulgación:* Papel, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Trabajo de tesis de graduación iniciado en 2012 en co-tutoría con la Prof. Ana Ferreira en el Instituto de Higiene de la Facultad de Medicina, en el contexto más amplio de la cooperación que mantiene el grupo que dirijo con el grupo del Prof. Homero Rubbo desde 2010. La Prof. Ferreira orienta la parte experimental de determinación de activación de PPAR por nitrolípidos en distintos tipos de líneas celulares principalmente para el caso de derivados nitrados del ácido araquidónico y quien escribe lo hace para la parte de modelado computacional de las interacciones entre el sitio de unión LBD de PPAR gamma y derivados nitroaraquidónico.

**Tesis/Monografía de grado**

*Inhibición de peroxiredoxinas: un enfoque teórico-experimental , 2012*

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* *Stephanie Portillo*

*Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Bioquímica*

*Palabras clave:* *peroxiredoxinas; inhibición; docking y modelado QM/MM*

*Áreas del conocimiento:* *Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Biológica -Química Teórica y Computacional*

*Medio de divulgación:* *Papel, Pais/Idioma: Uruguay/Español*

*Información adicional:* *Trabajo de graduación en co-tutoría con el Dr. Gerardo Ferrer (Laboratorio de Físicoquímica Biológica, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias). Inicio agosto 2010-Culminada Mayo 2012 Evaluadora externa: Madia Trujillo Calificación Final: 12/12*

**Tesis/Monografía de grado**

Modelado del proceso de formación de radicales etanolaminilo en el sitio activo de EAL/B12 , 2010

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Jenner Bonanata

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Bioquímica

*Palabras clave:* formación de radicales; EAL/B12; DFT B3LYP PCM

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Tesina desarrollada de agosto 2009 a Julio 2010. En proceso de presentación para su evaluación final externa. Calificación tutora: 12/12.

*Tesis/Monografía de grado*

*Efectos de la glicación del residuo K16 sobre la estructura y propiedades fisicoquímicas del fragmento 10-35 del péptido beta-amiloide , 2009*

*Tipo de orientación: Tutor único o principal*

*Nombre del orientado: Tamara Meirelles*

*Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Bioquímica*

*Palabras clave: modelado de la glicación de péptidos y proteínas; Simulaciones de dinámica molecular; Cálculos mixtos ONIOM DFT/AMBER*

*Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, péptidos y glicación en patologías*

*Medio de divulgación: Papel, Pais/Idioma: Uruguay/Español*

*Información adicional: Tesina de graduación de la Licenciatura en Bioquímica - Un mínimo de 90 hs de actualización bibliográfica y un mínimo de 280 hs de trabajo de experimental de investigación, con presentación de reporte final en formato artículo, evaluado externamente. Tutor único, dentro de proyecto de investigación de mi autoría. Calificación final: 11/12 La estudiante fue admitida en 2010 para desarrollar sus estudios doctorales en el área de modelado en el grupo de la Prof. Jill Gready en la Australian National University (Cambera).*

**Docente adscriptor/Practicantado**

Varias temáticas, ver información adicional - Pasante y Ayudante Gr.1, 20 hs del LQTC, 2007-2009. Colaborador externo 2010-2011 , 2007

*Tipo de orientación: Tutor único o principal*

*Nombre del orientado: Santiago Signorelli*

*Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay*

*Palabras clave: Abstracción de H de etanolamina; Modelos reducidos - PCM; Cinética VTST; Solvatación de moléculas simples*

*Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Química Teórica y Computacional*

*Pais/Idioma: Uruguay/Español*

*Información adicional: Inicia en 2007 pasantía de investigación bajo orientación de quien escribe como estudiante avanzado de la Lic. en Bioquímica, asumiendo en 2008 un contrato de Ayudante del LQTC por un año, mediante concurso de méritos y pruebas, dejando el cargo en abril 2009. Trabajó inicialmente en la caracterización de energética y cinética de un modelo reducido del proceso de abstracción de H del sustrato del sistema etanolamina amonio liasa/B12, incorporándose su contribución a una comunicación a congreso internacional concretada en 2010, y a un artículo aceptado en abril 2011 para publicación con modificaciones en la revista Computational & Theoretical Chemistry. Hacia mediados de 2008, comenzó a trabajar en la determinación de la energía de solvatación y coeficientes de reparto de una serie de pequeñas moléculas di y triatómicas, labor que originó un trabajo presentado por él mismo en Chile y por la Dra. Denicola en USA en el año 2009, que hemos publicado en Archives of Biochem. Biophys. en 2011.*

*Tesis/Monografía de grado*

*Interface para integración del software POLYRATE - Proyecto final Ingeniería en Sistemas - InCo , 2006*

*Tipo de orientación: Cotutor o Asesor*

*Nombre del orientado: Marcos Campot, Jorge Pena, Alfonso Vicente*

*Facultad de Ingeniería - UDeLaR , Uruguay , Ingeniería en Computación*

*Palabras clave: Polyrate - desarrollo de una GUI*

*Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Química Teórica y Computacional*

*Pais/Idioma: Uruguay/Español*

*Tesis/Monografía de grado*

*Análisis Comparativo del mecanismo de reacción del glioxal con metilamina y aminoguanidina y el papel del solvente en ellos: una primer aproximación a las etapas iniciales de la glicación y su inhibición , 2005*

*Tipo de orientación: Tutor único o principal*

*Nombre del orientado: Vanessa Leone*

*Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Bioquímica*

*Palabras clave: glicación: reacción de aminos con glioxal; papel del agua como catalizador; modelos cuánticos y PCM*

*Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Orgánica*

*Medio de divulgación: Papel, Pais/Idioma: Uruguay/Español*

*Información adicional: Trabajo Especial II del Plan 1992 de la Licenciatura 280 hs de actividad de investigación mínimas Trabajo presentado en formato artículo científico, aprox. 30 pp Calificación 12/12 La estudiante fue presentada en 2004 y admitida en 2005 bajo mi recomendación (y con un inicio de co-supervisión de la tesis, que luego se descartó debido a la baja comunicación existente) para realizar estudios doctorales en el área de modelado en el grupo del Prof. Paolo Carloni, en el International School of Advanced Studies (ISAS-SISSA) Trieste, Italia. Concluyó sus estudios exitosamente obteniendo el Ph.D. en Noviembre 2009. Actualmente desarrolla un post-doctorado en Alemania.*



Tesis/Monografía de grado

Fuente de la juventud: compuestos inhibidores del envejecimiento natural y patológico asociado a glucosilación no enzimática , 2004

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Vanessa Leone

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Bioquímica

*Palabras clave:* glicación, envejecimiento y patologías

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bases moleculares del envejecimiento y patologías de concentración

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Trabajo Especial I del Plan 1992 de la Licenciatura 90 hs de actividad de búsqueda y actualización bibliográfica monografía de aprox. 100 pp Calificación 12/12 Evaluador: Dr. Alfonso Cayota, Unidad de Patología Molecular, Facultad de Medicina.

Tesis/Monografía de grado

Cationes radicales convencionales y distónicos y su relación con el mecanismo de reacciones catalizadas por el sistema enzima-coenzima B12 , 2002

*Nombre del orientado:* Sylvia Vázquez

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Bioquímica

*Palabras clave:* catálisis por sistemas enzima/B12; radicales convencionales y distónicos

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Procesos enzimáticos radicalarios

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Trabajo Especial I - Plan 1992 de la Licenciatura en Bioquímica Iniciado en 2000 y culminado en 2002. Calificación final 8/12

Tesis/Monografía de grado

Análisis de la reactividad intrínseca de nucleobases en secuencias de ADN relevantes frente a la acción de los fármacos anticancerígenos Cisplatino y Mitomicina C , 2002

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Alexandra Castro

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Bioquímica

*Palabras clave:* reactividad de ADN; modulación del entorno local y global; Modelado potenciales ionización

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Química Teórica y Computacional, Bioinformática estructural

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Trabajo Especial II del Plan 1992 de la Licenciatura 280 hs de actividad de investigación mínimas Trabajo en formato artículo científico, aprox. 30 pp Calificación 10/12 Evaluador externo: Dra. Margot Paulino, Facultad de Química, UdeLaR.

[Tesis/Monografía de grado](#)

[Modelado de la unión covalente entre fármacos para el tratamiento del cáncer de la familia de Cisplatino y el ADN: análisis de la viabilidad molecular de compuestos alternativos de Pd\(II\) , 2001](#)

*Tipo de orientación:* [Tutor único o principal](#)

*Nombre del orientado:* [Pablo Dans](#)

[Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Bioquímica](#)

*Palabras clave:* [Modelado unión Cisplatino-ADN](#)

*Áreas del conocimiento:* [Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado de Compuestos Inorgánicos y su unión al ADN](#)

*Medio de divulgación:* [Papel, País/Idioma: Uruguay/Español](#)

*Información adicional:* [Trabajo Especial II del Plan 1992 de la Licenciatura 280 hs de actividad de investigación mínimas Trabajo en formato artículo científico, aprox. 30 pp Calificación 12/12](#)

Tesis/Monografía de grado

Química del daño de ADN causado por acción de radicales oxigenados y nitrogenados , 2001

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Alexandra Castro

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Bioquímica

*Palabras clave:* daño oxidativo de ADN; ROS y RNS

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / daño de ADN

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Trabajo Especial I - Plan 1992 Licenciatura en Bioquímica 90 hs de revisión y actualización bibliográfica Monografía de aprox. 80 páginas Calificación obtenida 11/12 Evaluador externo: Dr. Ricardo Ehrlich, Sección Bioquímica, Facultad de Ciencias, UdeLaR.

Tesis/Monografía de grado

Modelos teórico-computacionales para el estudio de sistemas bioquímicos , 2000

*Nombre del orientado:* Pablo Dans

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Bioquímica

*Palabras clave:* Métodos de modelado para sistemas bioquímicos

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Trabajo Especial I - Plan de Estudios 1992. 90 horas de búsqueda y actualización bibliográfica en el tema elegido. Se desarrolló entre 1999 y 2000 Documento final de 80 páginas. Calificación obtenida 12/12

## Otras

Iniciación a la investigación

Explorando el mecanismo catalítico de la Fumarato Reductasa-NADH dependiente de *T. cruzi* , 2016

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Santiago Sastre

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* Fumarato Reductasa; Mecanismo catalítico; NADH cofactor; Rol de agua

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de reactividad y mecanismos de reacción de Michael

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Enzimología computacional

*Medio de divulgación:* Papel, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Pasantía experimental de iniciación a la investigación de 3er año Licenciatura en Bioquímica (110 hs de actividad de investigación) iniciada en marzo 2016. Tutora principal: Laura Coitiño Co-tutora: Alicia Merlino Este trabajo dio base para la producción de dos presentaciones, una en formato poster, expuesta por el estudiante en el 42 Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (Quitel2016) el 23/11/16 y en forma oral en las Jornadas de Seminarios del Instituto de Química Biológica el 13/12/16.

Iniciación a la investigación

Caracterización de modificaciones de Histona H1 por glicación como blancos para detección y tratamiento de patologías humanas (beca INI\_X\_2012\_1\_4310) , 2014

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Florencia Klein

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* Glicación de Histonas; Sinergia Glicación - Oxidación de Proteínas; QM/MM de proteínas y modificaciones

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

*Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* beca INI\_X\_2012\_1\_4310 - desarrollada entre agosto 2013 y julio 2014

Iniciación a la investigación

PAIE-CSIC: Modelado computacional de la interacción entre ácido oleico y alfa-Lactalbúmina en la formación de HAMLET y su búsqueda en la venganza antitumoral , 2014

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* S. Cancela-F. Ferraro- I. Mastandrea - F. Klein

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* HAMLET - lactoalbúmina-oleico

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica

*Medio de divulgación:* Internet, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

[http://www.csic.edu.uy/renderPage/index/pageld/126#heading\\_4593](http://www.csic.edu.uy/renderPage/index/pageld/126#heading_4593)

*Información adicional:* Proyecto PAIE - Programa de Apoyo a la Investigación Estudiantil - Comisión Sectorial de Investigación Científica (CSIC) - UdeLaR Quien escribe actúa como tutora principal, con la colaboración de la Dra. Alicia Merlino como co-tutora del proyecto.

#### Iniciación a la investigación

En busca del origen de la reactividad diferencial frente a tioles de nitroalquenos de los ácidos grasos oleico, linoleico y linoleico conjugado , 2014

*Nombre del orientado:* Camila Sagasti

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* nitroalquenos de ácidos grasos; reactividad diferencial

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica

*Medio de divulgación:* Papel, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

<http://www.biociencias.org.uy/>

*Información adicional:* Pasantía de iniciación a la investigación, enmarcada en las actividades electivas de la Licenciatura en Bioquímica. El trabajo cierra con presentación en Jornadas nacionales de la Sociedad Uruguaya de Biociencias en formato poster en 2014 y a posteriori, en 2016 contribuyó parcialmente a un estudio teórico-experimental, elaborado en colaboración con el Lab. de Enzimología, en fase de envío a mediados de 2016.

#### Iniciación a la investigación

Profundizando en el conocimiento del mecanismo de la reacción de Michael entre nitroalquenos del ácido oleico y tioles , 2014

*Nombre del orientado:* Diego Pérez-Escanda

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* nitroalquenos de ácidos grasos; reacción de Michael

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica

*Medio de divulgación:* Papel, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

<http://www.biociencias.org.uy/>

*Información adicional:* Este trabajo se enmarca en pasantías de iniciación a la investigación desarrolladas en el marco de actividades electivas de la Licenciatura en Bioquímica que concluye en la presentación del trabajo en formato poster en las Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias a sostenerse en setiembre 2014. Se contó con la co-orientación del Lic. Jenner Bonanata.

#### Iniciación a la investigación

Nitrolípidos como posibles fármacos para tratamiento de IBDs por medio de la interacción con PPARgamma (INI-X\_2011\_1\_3918) , 2013

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* María Victoria Veroli

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* Nitrolípidos (oleico, linoleico, araquidónico); Receptor PPARgamma, interacciones; modelado computacional QM, QM/MM

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

[http://www.anii.org.uy/web/static/Informe\\_cierre\\_convocatoria\\_BE\\_ININ\\_1\\_2011.pdf](http://www.anii.org.uy/web/static/Informe_cierre_convocatoria_BE_ININ_1_2011.pdf)

#### Iniciación a la investigación

Estudio del mecanismo de reacción y el origen del poder catalítico de la peroxirredoxina V abordado desde un enfoque teórico-experimental-(INI\_X\_2010\_2\_2839)-2011-2012 , 2012

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Stephanie Portillo

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* Modelado computacional; Peroxirredoxina V; Formación de ácido sulfénico

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Enzimología computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural de Proteínas

*Medio de divulgación:* Papel, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* En co-tutoría con el Dr. Gerardo Ferrer-Sueta (Lab. de Físicoquímica Biológica, Facultad de Ciencias) quien orienta la componente experimental de los estudios.



#### Iniciación a la investigación

Estudio mediante métodos mixtos QM/MM (ONIOM) de la abstracción de hidrógeno de la etanolamina por el radical adenosilo en el sitio activo de la etanolamina amonio liasa (contrato BE\_INI\_2010\_1752) , 2011

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Lic. Jenner Bonanata

*Palabras clave:* Radicales ; metabolismo patógenos entéricos; modelado DFT-PCM

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Biológica -Química Teórica y Computacional

Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Beca de iniciación a la Investigación ANII 2010- 2011 Inicio 01/07/2010-Cerrada exitosamente al 15/07/2011

#### Iniciación a la investigación

Modelado de los productos de daño oxidativo sobre bases guanina y su efecto sobre la estructura y estabilidad de cadenas cortas de ADN , 2003

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Alexandra Castro

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* Nucleobases, dímeros y hebras simples de ADN; Modelado computacional; Daño oxidativo

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Proyecto de iniciación a la investigación aprobado y financiado en convocatoria de CSIC, bajo tutoría de quien escribe. La estudiante de grado de Lic. en Bioquímica, continuó a través de este proyecto la temática iniciada en su tesina de graduación. Se desarrolló entre 2002 y 2003

#### Iniciación a la investigación

Undergraduate Research Internship - Code development for geometry optimizations using IMOMO , 1997

*Tipo de orientación:* Cotutor o Asesor

*Nombre del orientado:* Darrel Hurt

Minnesota Supercomputer Institute, University of Minnesota, Estados Unidos , Estados Unidos

*Palabras clave:* Integrated MO-MO strategy; Geometry optimization; Code Programming

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Estados Unidos/Inglés

*Información adicional:* Igual que en los dos casos anteriores

#### Iniciación a la investigación

MSI Undergraduate Research Internship - Testing IMOMO with semiempirical and DFT methods. , 1996

*Tipo de orientación:* Cotutor o Asesor

*Nombre del orientado:* Molli Noland

Minnesota Supercomputer Institute, University of Minnesota, Estados Unidos , Estados Unidos

*Palabras clave:* IMOMO; Testing performances

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Estados Unidos/Inglés

*Información adicional:* Estudiante no graduada de la Universidad de Minnesota (major in Computational Sciences) en pasantía de verano de iniciación a la investigación en el grupo del Prof. Donald G. Truhlar, con quien me desempeñaba como postdoctoral fellow y se me asignó el seguimiento por un trimestre de esta estudiante de verano.

#### Iniciación a la investigación

MSI Undergraduate Research Internship - Developing a new input format for Direct Dynamics Calculations , 1996

*Tipo de orientación:* Cotutor o Asesor

*Nombre del orientado:* Steve Clayton

Minnesota Supercomputer Institute, University of Minnesota, Estados Unidos , Estados Unidos

*Palabras clave:* Direct Dynamics; input format; programmg

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Estados Unidos/Inglés

*Información adicional:* Summer Undergraduate Research Internship en el grupo del Prof. D. G. Truhlar. La orientación de la pasantía fue asignada a quien escribe en el carácter de MSI postdoctoral fellow en la UofM

Otras tutorías/orientaciones

Caracterización de la modulación de la reactividad y mecanismo de reacción en procesos tio-Michael sobre el ácido graso NO<sub>2</sub>CLA por cambios en la naturaleza del tiol , 2016

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Alexander Cantou

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* reactividad de nitroalquenos de ácidos grasos; modelado de mecanismos de reacción; DFT-PCM

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de reactividad y mecanismos de reacción de Michael

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Pasantía de profundización de la Lic. en Bioquímica, electiva avanzada en modelado computacional de reacciones químicas. Inicio: marzo 2016. El estudiante ha solicitado iniciar su tesina de graduación en el área bajo orientación de quien escribe.

Otras tutorías/orientaciones

Modelado del mecanismo de ataque de Caspasa-3 sobre un sustrato representativo: disección de los efectos del entorno , 2016

*Tipo de orientación:* Cotutor en pie de igualdad

*Nombre del orientado:* Vera Skafar

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* Caspasa-3; Mecanismo catalítico; Modelado computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de estructura y propiedades de moléculas y macromoléculas

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Pasantía de profundización electiva de 3er año Licenciatura en Bioquímica. Tutora: Alicia Merlino; Co-tutora: Laura Coitiño

Otras tutorías/orientaciones

Caracterización in silico del mecanismo de la reducción de compuestos de Pt(IV) por tioles biológicos , 2013

*Nombre del orientado:* Ignacio Mastandrea

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* Anticancerígenos de Pt(IV); Reducción Pt(IV) a Pt(II) por tioles biológicos; DFT-PCM; ONIOM QM:QM

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Pasantía por llamado abierto a aspirantes para aproximarse a los temas de investigación en Química Teórica y Computacional. Estudiante de 3er año de la Licenciatura en Bioquímica 6 meses de duración (marzo-setiembre 2013), 10 hs/sem. mínimas

Otras tutorías/orientaciones

Modelado ONIOM de la selectividad en reacciones catalizadas de Candida Antactica Lipase B , 2013

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Sergio Ruschi Bergamachi Silva

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* Candida Antarctica Lipase B; ONIOM QM:MM

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de enzimas y su mecanismo

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Se orientó en abril 2013 al Lic. Sérgio Ruschi Bergamachi Silva, estudiante de Maestría en Química del Grupo de Modelagem Molecular e Simulação Aplicados - MMSA - UFRN, Brasil, bajo la orientación del Dr. Caio Lima Firme. La pasantía consistió en su entrenamiento en técnicas ONIOM QM/MM aplicadas al modelado de procesos en enzimas y su aplicación a la elucidación de la selectividad de los procesos catalizados por la Lipasa B de Candida Antarctica.

Otras tutorías/orientaciones

Caracterización de derivados nitrados de ácidos grasos insaturados con métodos de modelado computacional , 2012

*Nombre del orientado:* Victoria Veroli

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* nitrolípidos; ácido araquidónico; modelado de la reactividad y reconocimiento; DFT/PCM

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Pasantía honoraria de iniciación a la investigación en el LQTC, Facultad de Ciencias, UdeLaR. Este trabajo se enmarca en cooperación iniciada en marzo 2010 con el grupo del Prof. Homero Rubbo en Facultad de Medicina

Otras tutorías/orientaciones

Exploración de compuestos de Pt(IV) con potencial acción anticancerígena. , 2010

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Stephanie Portillo; Alvaro Pittini

Universidad de la República , Uruguay

*Palabras clave:* Anticancerígenos de Pt(IV); Iniciativas estudiantiles

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Programa de Apoyo a la Realización de Proyectos de Investigación para Estudiantes Universitarios – Llamado 2010. Proyecto presentado para aspirar a financiamiento el 30/06/2010. No fue financiado pero el trabajo se ha continuado desarrollando con menor dedicación de los implicados (Pittini hasta marzo 2011 y Portillo hasta junio 2011, trabajando al presente en la escritura de un primer borrador completo de manuscrito para publicación).

Otras tutorías/orientaciones

Modelado de la estructura y reactividad de aniones radicales de compuestos biocativos de Pt/Pd con tiosemicarbazonas , 2010

*Nombre del orientado:* Lucía Minini

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* compuestos de Pt/pd con tiosemicarbazonas; nitro-aniones radicales; Funciones e índices de Fukui; DFT/PCM

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Trabajo de iniciación a la investigación co-dirigido con la Dra. Alicia Merlino en el LQTC, bajo contrato de Ayudante de la Bach. Minini entre agosto y diciembre 2010 y en forma honoraria en 2011, sin haberse dado por concluido, está en estos momentos en suspenso.

Otras tutorías/orientaciones

Modelado de la estructura y propiedades de compuestos de Pt(IV). , 2009

*Nombre del orientado:* Alvaro Pittini

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* Anticancerígenos de Pt(IV) y Pt(II); Efecto de la solvatación ; DFT - PCM; Data Mining (HCA y PCA)

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Pasantía honoraria de iniciación a la investigación (1er semestre 2009 y 2010) y Ayudantías en el LQTC (2do semestre 2009 y 2010) La labor desarrollada dio lugar en noviembre 2009 a una presentación oral seleccionada en las 6tas Jornadas de la SBBM a cargo del estudiante y en 2010 a una comunicación formato poster en un congreso internacional en España a cargo de su tutora. El Bach. Pittini dejó de trabajar activamente en esta línea en marzo 2011, cuando asumió un contrato full-time en el grupo de Inmunología, en una etapa previa a la elaboración del artículo correspondiente, labor que quedó pendiente).

Otras tutorías/orientaciones

Ayudantía en Química Teórica - inicio a la investigación -2008-2009 , 2009

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Leticia Couto

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* Acuación de Picoplátino; DFT B3LYP PCM; Mecanismos de reacción

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Ingreso al cargo de Ayudante 20 hs/sem. por un año, como estudiante de grado avanzada. Se tutoró el trabajo hasta la presentación en las jornadas de la SBBM de 2009 de una comunicación formato poster.

Otras tutorías/orientaciones

Pasante y Ayudante Gr.1, 20 hs del LQTC/2004-2008-Varios temas, ver información adicional , 2008

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Matías Machado

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* EAL/B12; protonación total/parcial; Continuum Models

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Trabajó inicialmente como pasante de iniciación, hasta obtener un contrato como Ayudante del LQTC por un semestre en 2004 y luego por concurso de méritos y pruebas de 2005-2008. Trabajó inicialmente en el modelado del efecto del medio sobre el mecanismo, energética y cinética de la etapa de migración 1,2 de NH<sub>3</sub> en el sustrato de la enzima Etanolamina Amonio Liasa. En segunda instancia se acopló al trabajo de un proyecto I+D de mi autoría, trabajando con simulaciones de dinámica molecular del complejo [Ru(II)(bpy)<sub>2</sub>dppz]<sup>2+</sup> y sus interacciones con ADN. Desarrolló una herramienta para el procesamiento en batch de estructuras de ADN con el programa CURVES. Al graduarse pasó a desarrollar su Tesis de Maestría en el Instituto Pasteur de Montevideo.

Otras tutorías/orientaciones

Ayudante investigación CSIC I+D y LQTC/2005-2008/Switches moleculares de luz de [Ru(II)(dppz)<sub>2</sub>L<sub>2</sub>]<sup>2+</sup> e interacción con ADN , 2007

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Leonardo Darré

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* Molecular Light Switches; DNA interactions; TD-DFT PCM Dinámica Molecular

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Ayudantía bajo contrato en proyecto CSIC I+D de mi autoría. Trabajó entre 2005 y 2007 en este contexto, y luego continuó por el bienio 2007-2008 trabajando en los mismos temas bajo mi orientación, hasta el momento de su graduación e inicio de una Tesis de Maestría en el Instituto Pasteur, cortando en ese momento todo vínculo con nuestro equipo.

Otras tutorías/orientaciones

Ayudante investigación proyecto CSIC I+D/2005-2007 - Simulaciones ADN condiciones fisiológicas , 2005

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Gustavo Mourglia

*Palabras clave:* Dodecámeros de ADN duplex; Simulaciones de dinámica molecular; Análisis estructural

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Orientación del trabajo como Ayudante de Investigación (no graduado) en proyecto de mi autoría. Tema de trabajo: Modelado de plantillas de ADN en condiciones fisiológicas

Otras tutorías/orientaciones

Pasantía y Ayudantía de investigación proyecto CSIC I+D/2003-2005/Estructura y espectroscopía de complejos [Ru(II)(dppz)L<sub>2</sub>]<sup>2+</sup>, 2005

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Alicia Merlino

Facultad de Ciencias - UDeLaR, Uruguay

*Palabras clave:* switches moleculares de luz [Ru(II)(dppz)L<sub>2</sub>]<sup>2+</sup>; Modelado estructura y UV-Vis; DFT - PCM - TDDFT

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Química Teórica y Computacional

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* La estudiante comenzó a hacer sus primeras experiencias de investigación en 2003, luego de cursar Qca. Computacional bajo orientación de quien escribe. Trabajó parte de 2004 y fue contratada por proyectos entre fin de 2004 y 2005. Dejó el trabajo para dedicarse a Qca. Orgánica, donde realizó su tesina de graduación y tesis doctoral, reincorporándose a nuestro Laboratorio y a la misma línea de investigación en 2009, ya como Prof. Adjunta.

Otras tutorías/orientaciones

Becario Investigación CSIC-I+D y Ayudante del LQTC/1995-1999/Modelado de complejos catión radical con aceptores/dadores de H, 1999

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Leonardo Lucchini

Facultad de Ciencias - UDeLaR, Uruguay

*Palabras clave:* MP2 - DFT B3LYP; Cationes radicales distónicos; Estructura y reactividad

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Comenzó a trabajar como estudiante no graduado de Ingeniería Química contratado entre 1995 y 1997 como becario de investigación por proyecto, tomando sus primeros cursos en Química Computacional en paralelo. Trabajó con métodos MP2 y B3LYP en la caracterización de complejos débiles de cationes radicales del alcohol vinílico. Desarrolló en el contexto de su contrato del proyecto una pasantía en la Universidad de Girona, España, para entrenarse en el empleo de herramientas para establecer semejanza molecular. Continuó trabajando en investigación en este tema entre 1997-1999 ya en el contexto de un contrato como Ayudante del LQTC.

## Tutorías en marcha

### Posgrado

Tesis de doctorado

Estudio comparativo de hidroxilamido- y peroxo-compuestos de vanadio(V) desde un abordaje teórico - experimental, 2015

*Tipo de orientación:* Cotutor en pie de igualdad

*Nombre del orientado:* M.Sc. Q.F. Gabriel Arrambide

Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay, Doctorado en Química

*Palabras clave:* compuestos de V(V) bioactivos y miméticos de VPHO; Capacidad antitumoral; Catálisis de bromación

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Inorgánica Medicinal

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Co-tutora con la Dra. Dinorah Gambino (Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química). El trabajo se desarrolla en Facultad de Química (parte experimental) y Facultad de Ciencias (labor de modelado computacional). Fecha oficial de inicio 18/06/2015

Tesis de doctorado

Peroxirredoxinas: Eficientes reductoras de peróxidos, eficientemente reducidas por tiorredoxinas. Papel de los aminoácidos conservados en el ciclo catalítico y sobreoxidación de Prx5 - Beca CAP doctoral 2016-2018, 2013

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Lic. Stephanie Portillo

Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay, Doctorado en Química

*Palabras clave:* Peroxiredoxina 5; reactividad; mecanismo

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Posgrado en Química iniciado en 2013. Defensa exitosa de pasaje de Maestría a Doctorado desarrollada el 23/06/15 (Tribunal: Cecilia Giacomini, Gustavo Salinas y Oscar Ventura) Actúo como Directora Académica y Directora de Tesis (esta última función compartida con Gerardo Ferrer-Sueta, quien orienta la componente experimental de la tesis). Tuvo beca de posgrado de CAP-UdelaR 2013-2015 y obtuvo beca de Doctorado por el período 2016-2018 del programa de becas de posgrado nacional de la ANII y de CAP-UdelaR, asumiendo la segunda.

Tesis de doctorado

Propiedades del tiol de la Albúmina Sérica Humana y sus derivados por oxidación con H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> y la sinergia glicación-oxidación: un enfoque integrado experimental y teórico (beca ANII Maestría 2012-2014, Doctorado 2014-2016) , 2011

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Lic. Jenner Bonanata

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química

*Palabras clave:* Mecanismos de reacción; modelado QM/MM y MD de proteínas; modif. postraducción de HSA-oxidación+glicación)

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Enzimología experimental

y computacional

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Tesis de Doctorado en Química del Lic. Jenner Bonanata, co-dirigida con la Dra. Beatriz Alvarez (Enzimología Experimental). Directora Académica de la tesis. Estos estudios iniciaron en 2011 y se extendieron hasta diciembre 2013 como estudios de Maestría en Química, realizándose con éxito la defensa para el pasaje de Maestría a Doctorado el pasado 19/12/13. Desde marzo 2014 a la fecha, obtuvo una beca de doctorado ANII para completar sus estudios de posgrado y acaba de ingresar al SNI (2016) como candidato a investigador.

## Grado

Tesis/Monografía de grado

Modificaciones post-traduccionales en la enzima peroxiredoxina 6 humana (hPrdx6): consecuencias de su fosforilación y glicación , 2017

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Santiago Sastre

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Bioquímica

*Palabras clave:* Peroxiredoxina 6; PTMs: Fosforilación/Glicación; Modelado y Simulación computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica de proteínas

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional, Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Tesina de graduación. Inicio mayo 2017. Tutora principal, en co-tutoría con la Lic. Stephanie Portillo

Tesis/Monografía de grado

Estudio in silico de la reacción Tiol-Michael del ácido nitrolinoleico conjugado (NO<sub>2</sub>CLA) y tioles en medio acuoso y en PPAR $\gamma$ ; , 2016

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Alexander Cantou

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Bioquímica

*Palabras clave:* Nitrolinoleico conjugado; reacción de Michael; tioles ; mecanismo; PPAR $\gamma$

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Tesina de la Licenciatura en Bioquímica Tutora única, inicio oficial 13/10/16

Docente adscriptor/Practicantado

Físicoquímica Moderna; Termoquímica y Cinética Computacional; Predicción y análisis in silico de estructura de proteínas , 2016

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Lic. Jenner Bonanata

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* Físicoquímica Moderna

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de estructura y propiedades de moléculas y macromoléculas

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Supervisión de la preparación del Lic. Bonanata (ingreso a la carrera docente en mayo 2016) para la enseñanza de grado y posgrado

Docente adscriptor/Practicantado

Fisicoquímica Moderna; Termoquímica y Cinética Computacional; Predicción y análisis in silico de estructura de proteínas , 2009

*Nombre del orientado:* Stephanie Portillo

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* Nitración de ácidos grasos; Efectos del medio; DFT PCM

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Inicio a la investigación de la por entonces Bach. Stephanie Portillo, en el contexto de su contrato como Ayudante, 20 hs/sem. en el LQTC, ingresando a la carrera docente en la UdelaR. En julio 2010 se incorporó al trabajo realizado para una presentación sobre anticancerígenos de Pt(IV) comunicada en un congreso internacional en España, y dentro del mismo tema, aportó para la elaboración de un proyecto CSIC de investigación estudiantil. Desde marzo 2010 y hasta 2012 en forma activa su trabajo se integró a una línea de cooperación con trabajo experimental conducida por los Dres. Homero Rubbo y Andrés Trotchansky en Facultad de Medicina sobre propiedades fisicoquímicas de nitroalquenos de ácidos grasos, con participación en varias comunicaciones a congresos entre 2011 y 2013. En 2012 esa línea es tomada por otra estudiante del grupo, Victoria Veroli y se concentra en actividades ligadas a Peroxiredoxinas, su eficiencia catalítica y su eficiencia redox, en la que desarrolló su tesina de graduación e inició estudios de posgrado (2013-2015 a nivel de Maestría, desde entonces a nivel doctoral). En 2015 se trabajó y acompañó en su preparación para encargarse de temas de Termodinámica Estadística y cinética. En 2016, ya como Asistente del Laboratorio está volviendo a colaborar con estudios de nitroalquenos de ácidos grasos y tioles, trabajando en una primer experiencia de co-orientación de un estudiante de grado y participa en teórico-prácticos de dos cursos de posgrado.

## Sistema Nacional de Investigadores

### Otras

Otras tutorías/orientaciones

'Proteínas de la vida, en salud y enfermedad (Dengue y Alzheimer)' - Pasantía 4to Año Profesorado Cs. Biológicas IPA , 2017

*Tipo de orientación:* Asesor/Orientador

*Nombre del orientado:* Romina Bonavota; Denise Pérez; Nicolás Vanrell

Instituto de Profesores Artigas , Uruguay

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica de proteínas

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Tutor de pasantía en el IPA: Dr. Daniel Fabián. Co-tutora investigadora en LQTC-IQB, Facultad de Ciencias

Otras tutorías/orientaciones

Caracterización de la reactividad de residuos blanco de la glicación en variantes de péptido beta-amiloide , 2012

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Lic. Lucía Minini

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* Glicación beta amiloide; Alzheimer; modelado QM/MM ONIOM

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Trabajo de investigación iniciado en el marco de Ayudantía en Química Teórica y Computacional entre diciembre 2011-junio 2012; fue retomado en marzo 2015 como línea de investigación en cercanía a la que desarrolla en su tesis de posgrado en el LQTC, con algún avance limitado. Se trabajó con la Lic. Minini entre 2012 y 2014 en simulaciones de la estructura y dinámica de complejos del receptor nuclear SF-1 WT y con variantes asociadas a patologías, que ha dado lugar a una publicación científica arbitrada en revista internacional en 2015 y entre 2014 y 2015 en estudios de interacciones de compuestos de coordinación con ADN, que se están extendiendo al presente a otros compuestos.

## Otros datos relevantes

### Premios y títulos

1992 Premio Folia Chimica Theoretica Latina (cuarta edición) - Mejor trabajo de actualización publicado en el bienio (Internacional) Folia Chimica Theoretica Latina

Premio otorgado al mejor trabajo de revisión publicado en la revista en el bienio. La Folia Chimica Theoretica Latina era el órgano oficial de la Sociedad de Químicos Teóricos de Expresión Latina, de carácter internacional.

1999 Premio TWAS-CONICYT al mejor joven investigador del país, área Química (Nacional) TWAS-CONICYT

Premio otorgado por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y técnicas (CONICYT-MEC) y la Academia del Tercer Mundo (TWAS) al mejor joven científico (hasta 35 años) del país en el área Química.

2004 Mejor trabajo de sesión en el Simposio de Biología Molecular y Bioquímica (Nacional) Sociedad Uruguaya de Biociencias - Sociedad de Biología Molecular y Bioquímica

Mejor trabajo de sesión (con evaluación internacional) en las Jornadas de la Sociedad de Biología Molecular y Bioquímica (SBBM).



1991 Investigador Honorario Grado 3 PEDECIBA Química-1991-1994 (Nacional) PEDECIBA-Área Química  
Ingresé como Investigador Honorario Gr.3 del área Química apenas completé mis estudios de Maestría. En la siguiente convocatoria para re-evaluación presente mis méritos y fui ubicada en la posición de Investigador Honorario GR.5.

1994 Investigador Honorario Grado 5 (Primer Nivel) -PEDECIBA-Química-1994-2005 (Nacional) PEDECIBA-Química  
Fui designada Investigador Gr.5 del área Química del PEDECIBA en 1994, siendo renovada en tal posición en todas las convocatorias desarrolladas durante la década sucesiva. A comienzos de 2005 estando ya desde hacía varios meses con un fuerte quebranto de salud, al no poder presentar mi currículum en el formato CVLattes introducido ese año (algo que fue comunicado a la Comisión del Área) fui desvinculada de inmediato del Programa. Ante esa situación, no volví a presentarme para ingresar al mismo en los 7 años posteriores.

1995 Minnesota Supercomputer Institute International Research Scholar (Internacional) Minnesota Supercomputer Institute, Univ. Minnesota  
Concurso internacional que otorgara grants en base al currículum de los investigadores y el proyecto de trabajo presentado. En mi caso el proyecto fue presentado para trabajar junto al Prof. Donald G. Truhlar en el Instituto de Tecnología de la Universidad de Minnesota, Campus de Twin Cities, Minneapolis, donde estuve trabajando a nivel post-doctoral entre 1995 y 1997.

2006 Evaluada con méritos suficientes para ocupar un cargo de Profesor Titular, Gr.5 (Nacional) Facultad de Ciencias - UDELAR

Realizado un llamado a aspiraciones para ocupar 2 cargos de Profesor Titular entre las áreas Biología, Centro de Investigaciones Nucleares y Química Biológica de Facultad de Ciencias de la Universidad de la República, la Comisión Asesora (integrada por Ricardo Ehrlich, Enrique Lessa, Omar Macadar, Patrick Moyna y Eduardo Osinaga) me declaró poseedora de méritos suficientes para ocupar una de esas plazas.

2009 Investigador Activo del SNI (Nacional) ANII  
Ingreso a la categoría activa, Nivel I (se deja constancia de no haber logrado ingresar toda la información de méritos previos, actualmente presente en la ficha para esa primer evaluación). Solicité en la primer re-evaluación ser considerada para la categoría de nivel II en función de mi historial completo de méritos. En 2013 por motivos de salud no pude presentar el formulario para re-evaluación. Solicito el reingreso en el llamado de 2014, acabo de ser reincorporada al Sistema. He presentado el pedido de reconsideración a la categorización realizada en esta última instancia, visto que se omitieron en la evaluación muchas de mis contribuciones y otras no fueron reflejadas cabalmente.

2015 Investigador Honorario Gr. 4 (Primer Nivel) PEDECIBA-Química (Nacional) PEDECIBA-Química

2016 Editora asociada por invitación (Internacional) Journal Molecular Modeling

## Jurado/Integrante de comisiones evaluadoras de trabajos académicos

Tesis

*Candidato:* M.Sc. Agustín Correa

E. Laura Coitiño; M. PAULINO; A. BUSCHIAZZO; P. AGUILAR; G. GONZÁLEZ

Diseño e implementación de nuevas herramientas para la solubilización, evolución y cristalogénesis de proteínas , 2014

Tesis (Doctorado en Ciencias Biológicas) - Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

Tesis

*Candidato:* Damián Scherlis Perel

E. Laura Coitiño; G. ESTIÚ; F. DOCTOROVICH

Simulación de reactividad Química en Hemoproteínas , 2002

Tesis (Doctorado en Química) - Universidad de Buenos Aires - Argentina

*Referencias adicionales:* Argentina , Español

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, hemoproteínas

Otros tipos

*Candidato:* Varios

E. Laura Coitiño

Múltiples - evaluación de posters Jornadas +Biofísica , 2013

Otra participación (Posters en Jornadas +Biofísica) - Facultad de Ciencias - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica



Otros tipos

*Candidato:* Múltiples - 60 posters evaluados

E. L. Coitiño; F. ILLAS; J. ANDRÉS; F. HERNÁNDEZ LAGUNA

Sesiones de exposición de posters del congreso internacional QUITEL 2012 - Natal, Brasil , 2012

Otra participación (Evaluación de Posters en el congreso internacional QUITEL 2012 - Natal -Brasil)

*Referencias adicionales:* Brasil , Inglés

## Presentaciones en eventos

Congreso

43r Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (CHITEL 2017): Expositor oral, panelista e integrante Comité Científico internacional , 2017

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 30

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* CHITEL 2017 - 43rd Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression;

*Nombre de la institución promotora:* Ecole Normale Supérieure de Paris (ENSP) - CNRS- Sorbonne Universités

*Palabras clave:* Química Teórica y Computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional, Bioinformática Estructural

Congreso

Congreso nacional de Biociencias - Co-autora expo, oral+poster, evaluadora posters, organización por SBF.uy , 2017

*Tipo de participación:* Otros, *Carga horaria:* 24

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Congreso Nacional de Biociencias; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Uruguaya de Biociencias y seccionales/sociedades amigas

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biología Estructural de proteínas

Congreso

56th Sanibel Symposium - expositor oral 1 trabajo y expositor 1 poster , 2016

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 48

*Referencias adicionales:* Estados Unidos; *Nombre del evento:* 56th Sanibel Symposium; *Nombre de la institución promotora:* Quantum Theory Project (QTP), University of Florida

*Palabras clave:* Modulación de la reactividad por el entorno; oxidación de tioles por H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>; MD y QM/MM de reacciones en proteínas; MD+QM/MM reconoc. lactoalbúmina-ác.grasos; HAMLET:lactoalbúmina-oleato

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de proteínas, QM/MM, dinámica molecular

Conferencista oral seleccionada con el trabajo 'Modulating the Reactivity of Biological Thiols and the Mechanism of Reaction with H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> by Hydrogen Bonding in Their Local Environments' y expositora del poster 'Poster-Modeling the Interaction of Oleic Acid with two &#945;-Lactalbumin Folding Variants: in Route towards Deciphering the Molecular Basis of HAMLET's Antitumoral Activity'

Congreso

42mo Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (Quitel2016), Co-chair, expositora oral, coautora 2 orales y 3 posters , 2016

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Quitel2016; *Nombre de la institución promotora:* UdelaR-IPMON

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de estructura y propiedades de moléculas y macromoléculas

Congreso

Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology - Organizadora, Chair de sesión, co-autora de 4 posters y una oral, expositora de 1, evaluadora de posters , 2015

*Tipo de participación:* Moderador, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology; *Nombre de la institución promotora:* SBF.uy (Seccional Biofísica Uruguay) y SAB (Sociedad Argentina de Biofísica)

*Palabras clave:* Computational Biophysics

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioquímica Computacional, Química Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica Computacional

Trabajé desde 2014 en la organización de este evento, desarrollado en el Complejo de la Comisión Técnico-Mixta de Salto Grande del 26-29 de noviembre de 2015. Fui chair de simposio (Computational Biophysics) y expositora de un poster y co-autora de otros 3, además de coautora de una exposición oral a cargo de una de mis estudiantes de doctorado.

Congreso

WATOC 2014- Congreso Mundial de Químicos Teóricos, Chile - expositora oral seleccionada-expositora de 1 poster - coautora de 1 oral y 4 posters más , 2014

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Chile; *Nombre del evento:* Watoc 2014 - Third Triennial congress of the World Association of Theoretical Chemists; *Nombre de la institución promotora:* WATOC

*Palabras clave:* Química Teórica

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Congreso

2das Jornadas +Biofísica - congreso nacional de la seccional SBF.uy - Chair, evaluadora posters, coautora 6 posters y 1 oral , 2013

*Tipo de participación:* Comentarista, *Carga horaria:* 24

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 2das Jornadas +Biofísica -2013; *Nombre de la institución promotora:* SBF.uy

Chair de sesión de Simulaciones y Modelización de Biomoléculas Evaluadora de trabajos de estudiantes

Congreso

XVIII Internat. Workshop Quantum systems in Chemistry, Physics & Biology, Paraty, Brasil - expositora 1 poster y 2 short presentations, coautora 1 poster , 2013

*Tipo de participación:* Otros, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* XVIII Internat. Workshop Quantum systems in Chemistry, Physics & Biology; *Nombre de la institución promotora:* Universidad de Rio de Janeiro

Congreso

Quitel 2012, Congreso internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Natal Brasil - expositora oral seleccionada + expositora 2 posters, evaluadora posters , 2012

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* Quitel 2012, Congreso internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina; *Nombre de la institución promotora:* Universidad Federal de Río Grande del Norte

Congreso

Winter Modelling 2011 - SNS, Pisa, Italia -Expositora oral invitada , 2011

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 24

*Referencias adicionales:* Italia; *Nombre del evento:* Winter Modelling 2011; *Nombre de la institución promotora:* Scuola Normale Superiore, Pisa

*Palabras clave:* Reactividad purinas ADN modulada por entorno; Compuestos bioactivos de Pt/Pd/Ru

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional sistemas interés biológico, QM/MM, dinámica molecular

Congreso

QBIC 3 - Quantum Bioinorganic Chemistry 3, Czesky Krumlov, Rep. Checa - Expositora 1 poster , 2011

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 30

*Referencias adicionales:* República Checa; *Nombre del evento:* QBIC 3 - Quantum Bioinorganic Chemistry 3;

Congreso

X Jornadas de Investigación de la Facultad de Cs. Sociales, Montevideo, 2011 - Expositora 1 poenncia oral , 2011

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 6

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* X Jornadas de Investigación de la Facultad de Cs. Sociales;

Congreso

7mas Jornadas de la SBBM, Montevideo - expositora de 1 poster, coautora de otros , 2011

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 20

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 7mas Jornadas de la SBBM; *Nombre de la institución promotora:* SUB - SBBM

Congreso

4th International Conference on Concept Mapping, Viña del Mar, Chile - Expositora de un poster , 2010

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 24

*Referencias adicionales:* Chile; *Nombre del evento:* 4th International Conference on Concept Mapping;

Congreso

Jornadas Regionales sobre la formación en docencia universitaria, FHCE-UdelaR, 2010 - Expositora oral , 2010

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 16

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Jornadas Regionales sobre la formación en docencia universitaria; *Nombre de la institución promotora:* FHCE-UDELAR

Congreso

IV Foro de Innovaciones en Educación Superior. FCEE, 2010 - Expositora 2 orales , 2010

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 20

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* IV Foro de Innovaciones en Educación Superior; *Nombre de la institución promotora:* UDELAR

#### Congreso

7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA), Oviedo, España - Expositora poster , 2010

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* España; *Nombre del evento:* th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA);

#### Congreso

IX Girona Seminar Electron Density, Density Matrices, and Density Functional Theory, Girona, España- Expositora 1 poster , 2010

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* España; *Nombre del evento:* IX Girona Seminar Electron Density, Density Matrices, and Density Functional Theory;

#### Congreso

XXXIV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Cetraro, Italia - Expositora oral plenaria , 2008

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado,

*Referencias adicionales:* Italia; *Nombre del evento:* XXXIV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina; *Nombre de la institución promotora:* Asociación Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

#### Congreso

XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 07), La habana, Cuba - Expositora oral seleccionada - Expositora 1 poster , 2007

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Cuba; *Nombre del evento:* XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 07);

#### Congreso

6th Int. conference of Biological Physics, 5th Southern Cone Biophysics Congress, Montevideo - Expositora poster, coautora 2 posters , 2007

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 6th Int. conference of Biological Physics, 5th Southern Cone Biophysics Congress; *Nombre de la institución promotora:* IUPAB

#### Congreso

Conference on Drug Development for the Third World, ICTP, Trieste, Italia - Expositora 2 posters, coautora 1 poster , 2006

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Italia; *Nombre del evento:* Conference on Drug Development for the Third World; *Nombre de la institución promotora:* ICTP

#### Congreso

XXX Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Porto, Portugal - Expositora poster - coautora de 1 oral seleccionada y 1 poster , 2004

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Portugal; *Nombre del evento:* XXX Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina;

#### Congreso

XVII Congreso Nacional e Internacional de Profesores de Química - Uruguay - Ponente invitada , 2004

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 24

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* XVII Congreso Nacional e Internacional de Profesores de Química; *Nombre de la institución promotora:* Asociación de Educadores en Química - Uruguay

*Palabras clave:* Enseñanza de la Química; Estructura Molecular; Visualización asistida por PC

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

#### Congreso

XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Montevideo - Chair, organizadora, coautora 6 posters , 2002

*Tipo de participación:* Moderador, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina;

#### Congreso

Sanibel Symposium 2002, St. Augustine, FL, USA - Expositora 2 posters + sus respectivos 1 minute paper , 2002

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Estados Unidos; *Nombre del evento:* Sanibel Symposium 2002; *Nombre de la institución promotora:* QTEP

Congreso

XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Caxambu, Brasil - Expositora oral invitada - coautora 1 poster , 2000

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL);

Congreso

Xth International Congress of Quantum Chemistry, Menton, Francia - Expositora 2 posters , 2000

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Francia; *Nombre del evento:* Xth International Congress of Quantum Chemistry;

Congreso

Sanibel Symposium 1999, St. Augustine, FL, USA - Expositora 1 posters + su 1 minute paper , 1999

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Estados Unidos; *Nombre del evento:* Sanibel Symposium 1999;

Congreso

XXIV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Puebla, Mexico - Expositora oral + expositora 2 posters , 1998

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* México; *Nombre del evento:* XXIV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina;

Congreso

IAI & NASA Workshop 'Understanding ozone and UV-B radiation. Past Accomplishments and Future Opportunities' - Expositora 1 poster , 1998

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 30

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* IAI & NASA Workshop 'Understanding ozone and UV-B radiation. Past Accomplishments and Future Opportunities'; *Nombre de la institución promotora:* IAI & NASA

Congreso

9th International Congress on Quantum Chemistry, Atlanta, USA - Expositora de 3 posters , 1997

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Estados Unidos; *Nombre del evento:* 9th International Congress on Quantum Chemistry,;

Congreso

XXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Cáceres, España - Expositora 3 posters , 1996

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* España; *Nombre del evento:* XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina;

Congreso

8th annual Conference on New Methods in Electronic Structure Calculations, Minneapolis, MN, USA - Expositora 1 poster , 1996

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 30

*Referencias adicionales:* Estados Unidos; *Nombre del evento:* 8th annual Conference on New Methods in Electronic Structure Calculations;

Congreso

2nd Congress of the international Society for Theoretical Chemical Physics, New Orleans, USA - Expositora oral + Expositora 1 poster , 1996

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Estados Unidos; *Nombre del evento:* 2nd Congress of the international Society for Theoretical Chemical Physics;

Congreso

XXII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Pucón, Chile - Expositora 1 poster , 1995

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Chile; *Nombre del evento:* XXII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina;

Congreso

1st European Conference on Computational Chemistry, Nancy, Francia - Expositora 1 poster , 1994

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Francia; *Nombre del evento:* 1st European Conference on Computational Chemistry;

Congreso

XXI Congres des Chimistes Theoriciens d'Expresión Latine, Grenoble, Francia - Expositora 2 posters , 1993

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Francia; *Nombre del evento:* XXI Congres des Chimistes Theoriciens d'Expresión Latine;

#### Congreso

Xth International Workshop Horizons in Hydrogen Bond Research, Autrans, Francia - Expositora 2 posters , 1993

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Francia; *Nombre del evento:* Xth International Workshop Horizons in Hydrogen Bond Research;

#### Congreso

1st Congress of the international Society for Theoretical Chemical Physics, Girona, España - Expositora oral + Expositora 1 poster , 1993

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* España; *Nombre del evento:* 1st Congress of the international Society for Theoretical Chemical Physics;

#### Congreso

European Research Conference, San Feliu de Guixols, España , 1992

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* España; *Nombre del evento:* European Research Conference;

#### Congreso

XIX Congresso Internazionale dei Chimici Teorici d'Espressione Latine, Roma, Italia - Expositora 2 posters , 1990

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Italia; *Nombre del evento:* XIX Congresso Internazionale dei Chimici Teorici d'Espressione Latine;

## Sistema Nacional de Investigadores

#### Congreso

5to Simposio Brasileiro de Quimica Teorica (SBQT), Caxambu, Brasil - Expositora 3 posters , 1989

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* 5to Simposio Brasileiro de Quimica Teorica (SBQT);

#### Congreso

XVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, La Plata, Argentina - Expositora 2 posters - coautora de 1 poster más , 1989

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* XVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina;

#### Seminario

Seminario Nazionale di Chimica Fisica - Expositora oral , 1993

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Italia; *Nombre del evento:* Seminario Nazionale di Chimica Fisica -;

#### Simposio

2nd International Symposium 'Thiol metabolism and Redox Regulation of Cellular functions' - 3 posters, expositora de 1 , 2015

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 16

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 2nd International Symposium 'Thiol metabolism and Redox Regulation of Cellular functions'; *Nombre de la institución promotora:* ICGEB -IPMON - UDELAR

#### Simposio

Mini-Simposio: Modelización computacional de sistemas complejos de interés biológico y biomédico - Expositora oral , 2014

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 4

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Mini-Simposio: Modelización computacional de sistemas complejos de interés biológico y biomédico; *Nombre de la institución promotora:* CENUR Litoral Noroeste (Regional Norte), Salto, UdelaR

*Palabras clave:* Química Computacional; Modelado de biomoléculas; Interacciones reactivas y no reactivas

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de compuestos bioactivos

#### Simposio

International Symposium on Organic Reaction Mechanism, Shenzhen, China - Expositora oral invitada , 2013

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 16

*Referencias adicionales:* China; *Nombre del evento:* International Symposium on Organic Reaction Mechanism---A celebration in honor of Bob Grubbs, Ken Houk, Paul Schleyer and Don Truhlar; *Nombre de la institución promotora:* Pekin University, Graduate School of Shenzhen

## Simposio

Conferencia interdisciplinaria: Computación Científica de Alto Desempeño - PEDECIBA - FING - UdelaR , 2012

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 8

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Conferencia Interdisciplinaria 2012 Computación Científica de Alto Desempeño;

*Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA y NICCAD-UDELAR

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

## Simposio

1st Symposium Thiol Metabolism and redox regulation of Cellular Functions - Expositora 1 poster , 2011

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 24

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 1st Symposium Thiol Metabolism and redox regulation of Cellular Functions;

*Nombre de la institución promotora:* UDELAR - IPMON -ICGEB

## Simposio

5th TheoBio - Theoretical Biophysics International Symposium 2011, Madeira, Portugal - Expositora poster , 2011

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Portugal; *Nombre del evento:* 5th TheoBio - Theoretical Biophysics International Symposium ;

## Simposio

Eight Giambiagi Winter School Part B & Workshop - Expositora Oral - Sistemas Complejos en Físicoquímica Moderna , 2006

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* Workshop ;

## Simposio

Perspectivas para el desarrollo de la Bioinformática en el Uruguay, LATU, 2006 - Expositora oral invitada , 2005

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 30

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Perspectivas para el desarrollo de la Bioinformática en el Uruguay; *Nombre de la institución promotora:* LATU

## Taller

III CCES Workshop & SAIMS (South American Initiative on Molecular Simulations), Campinas, Brasil - conferencista invitado , 2016

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 48

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* III CCES Workshop & SAIMS (South American Initiative on Molecular Simulations);

*Nombre de la institución promotora:* Center for Computational Engineering & Sciences -Universidad de Campinas

*Palabras clave:* Biofísica computacional de proteínas; Enzimología Computacional; Modulaciòn de reactividad por el entorno proteico; Mecanismos de reacción; puntos de inflexión cresta-valle

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de proteínas, QM/MM, dinámica molecular

*Presentación:* 'MD simulations + QM/MM modeling used for understanding chemical reactivity and reaction mechanisms tuned by local environments (w/water and Hydrogen-Bonding as central protagonists)' E.L. Coitiño, 9th May 2016, Campinas

## Indicadores de producción

<i>Producción bibliográfica</i>	201
<i>Artículos publicados en revistas científicas</i>	40
Completo (Arbitrada)	39
Completo (No Arbitrada)	1
<i>Artículos aceptados para publicación en revistas científicas</i>	0
<i>Trabajos en eventos</i>	159
Completo (Arbitrada)	1
Resumen (Arbitrada)	152
Resumen (No Arbitrada)	3
Resumen expandido (Arbitrada)	3
<i>Libros y capítulos de libros publicados</i>	2
Libro publicado	2
<i>Textos en periódicos</i>	0
<i>Documentos de trabajo</i>	0
<i>Producción técnica</i>	13
<i>Productos tecnológicos</i>	9
Sin registro o patente	9
<i>Procesos o técnicas</i>	0

<i>Trabajos técnicos</i>	<i>0</i>
<i>Otros tipos</i>	<i>4</i>
<i>Evaluaciones</i>	<i>20</i>
Evaluación de Proyectos	4
Evaluación de Eventos	6
Evaluación de Publicaciones	9
Evaluación de Convocatorias Concursables	1
<i>Formación de RRHH</i>	<i>58</i>
<i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</i>	<i>49</i>
Tesis de maestría	5
Tesis de doctorado	3
Tesis/Monografía de grado	14
Iniciación a la investigación	12
Docente adscriptor/Practicantado	1
Otras tutorías/orientaciones	14
<i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha</i>	<i>9</i>
Tesis de doctorado	3
Tesis/Monografía de grado	2
Docente adscriptor/Practicantado	2
Otras tutorías/orientaciones	2

Sistema Nacional de Investigadores