



Curriculum Vitae

Margot PAULINO ZUNINI

Actualizado: 17/06/2017



Publicado: 20/07/2017

Sistema Nacional de Investigadores

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas

Categorización actual: Nivel II

Ingreso al SNI: Activo(01/03/2009)

Datos generales

Información de contacto

E-mail: margot@fq.edu.uy

Teléfono: +59829291558

Dirección: Avda General Flores 2124 11800-Montevideo Uruguay

Institución principal

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

Dirección institucional

Dirección: Facultad de Química - UDeLaR / Centro de Bioinformática Estructural - Departamento de Teoría y Estructura de la Materia y Afines / 11600 / Montevideo / Montevideo / Uruguay

Teléfono: (+02) 9291558

Fax: 9241906

E-mail/Web: margot@fq.edu.uy

Formación

Formación concluida

Formación académica/Titulación

Posgrado

1987 - 1993

Doctorado

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

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

Título: Relación estructura-actividad en compuestos nitro heterocíclicos con actividad tripanocida sobre Trypanosoma cruzi y otros tripanosomatdeos sensibles

Tutor/es: Andres Oscar Manuel Stoppani

Obtención del título: 1993

Palabras clave: t cruzi, bioinformatica farmacoquimica

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

Grado

1976 - 1982

Grado

Química Farmacéutica

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

Obtención del título: 1982

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química

Formación complementaria

Postdoctorado

- 2005 - 2006
Estadías postdoctorales en el Trinity College Dublin
Trinity College Dublin , Irlanda
Becario de: Nacional Aeronautics and Space Administration , Estados Unidos
Palabras clave: Chagas, nuevos fármacos
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / diseño de fármacos
- 2003 - 2004
Pasantías Postdoctorales en el Center for Biophysical Sciences and Engineering
University of Alabama at Birmingham , Estados Unidos
Becario de: Nacional Aeronautics and Space Administration , Estados Unidos
Palabras clave: trypanothione reductase
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Enfermedad de Chagas, Química Médica
- 2001 - 2001
Pasantía posdoctoral en la Laurentian University, Laboratory of Theoretical Chemistry, Sudbury, Ontario
Laurentian University , Canadá
Becario de: Nacional Aeronautics and Space Administration , Estados Unidos
Palabras clave: dinámica molecular
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural, Biomoléculas
- 1999 - 1999
Estadía postdoctoral en el Departamento de Química UFSCar
Universidad Federal de Sao Carlos , Brasil
Becario de: Swedish International Development Agency , Suecia
Palabras clave: dinámica molecular
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural, Biomoléculas
- 1999 - 1999
Estadía postdoctoral en la Estación experimental del Zaidín e Instituto Lopez-Neira
Instituto de Parasitología y Biomedicina 'López - Neyra' , España
Becario de: Swedish International Development Agency , Suecia
Palabras clave: bioinformática estructural
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural, Biomoléculas
- 1966 - 1999
Pasantía postdoctoral. Physicochemical Department. Uppsala University
Univerisdad de Uppsala , Suecia
Becario de: Swedish International Development Agency , Suecia
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural
- 1996 - 1996
Estadías postdoctorales de un mes en el IPP
Institut Pasteur Paris , Francia
Becario de: Nacional Aeronautics and Space Administration , Estados Unidos
Palabras clave: Chagas, nuevos fármacos
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / microcalorimetría
- 1995 - 1995
Pasantías postdoctorales. Physicochemical Department. Uppsala University
Univerisdad de Uppsala , Suecia
Becario de: Swedish International Development Agency , Suecia
Palabras clave: bioinformática estructural
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural, Biomoléculas
- 1994 - 1994
Pasantía postdoctoral en el Institut de Genetique et Microbiologie de la Universidad Paris Dus
Francia
Université Paris Sud (XI) , Francia
Becario de: Swedish International Development Agency , Suecia
Palabras clave: Aspergillus nidulans; DNA-CreA interactions
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-

| | |
|-------------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 1994 - 1994 | <p>Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural Pasantía postdoctoral.Physicochemical Department. Uppsala University Univerisdad de Uppsala , Suecia <i>Becario de:</i> Swedish International Development Agency , Suecia <i>Palabras clave:</i> bioinformática estructural <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas</p> |
| 1994 - 1994 | <p>ETH,ZURICH Swiss Federal Institute of Technology in Zurich / Eidgenössische Technische Hochschule (ETH) Zürich , Suiza <i>Becario de:</i> Swedish International Development Agency , Suecia <i>Palabras clave:</i> structural bioinformatics <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular</p> |
| 1994 - 1994 | <p>Working Party on Computational Chemistry Université de Nancy 2 , Francia <i>Becario de:</i> Swedish International Development Agency , Suecia <i>Palabras clave:</i> computational chemistry <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular</p> |

Construcción institucional

En mi calidad de investigadora, docente y coordinadora de la Maestría en Bioinformática, he contribuído con la evolución y consolidación del Área Bioinformática y en particular, de la carrera de posgrado, la que cuenta al presente con 72 inscriptos, 30 egresados y 11 Magister en Bioinformática titulados por PEDECIBA-UdeLaR. Desde el 2013, y en forma ininterrumpida, soy responsable del Proyecto financiado por CAP-UDeLaR 'Maestría en Bioinformática' el cual sustenta junto con PEDECIBA la consolidación de la carrera. Dentro de mi especialidad (Bioinformática Estructural) he formado y dirijo el Área Bioinformática del Departamento DETEMA de la Facultad de Química.

Idiomas

| | |
|----------|------------------------------------------------------------------------------|
| Español | Entiende (Muy Bien) / Habla (Muy Bien) / Lee (Muy Bien) / Escribe (Muy Bien) |
| Francés | Entiende (Muy Bien) / Habla (Muy Bien) / Lee (Muy Bien) / Escribe (Muy Bien) |
| Inglés | Entiende (Muy Bien) / Habla (Muy Bien) / Lee (Muy Bien) / Escribe (Muy Bien) |
| Italiano | Entiende (Bien) / Habla (Regular) / Lee (Bien) / Escribe (Regular) |

Areas de actuación

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, Diseño de compuestos Bioactivos
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

Actuación Profesional

Cargos desempeñados actualmente

| | |
|---------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| <i>Desde:</i> | 08/2014 |
| | Profesor Titular , (Docente Grado 5 Titular, 40 horas semanales / Dedicación total) , Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay |

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

Vínculos con la institución

01/1985 - 12/1985, *Vínculo:* Prof. Adjunto Provisional de Química Cuántica, Docente Grado 3 Interino, (24 horas semanales)

01/1988 - 12/1988, *Vínculo:* Profesor Adjunto de Química Cuántica, Docente Grado 3 Interino, (36 horas semanales / Dedicación total)

04/1979 - 12/1982, *Vínculo:* Ayudante, Docente Grado 1 Interino, (15 horas semanales)

04/1983 - 12/1983, *Vínculo:* Asistente Honorario, Docente Grado 2 Honorario, (20 horas semanales)

02/1988 - 12/1989, *Vínculo:* Profesor Adjunto, Docente Grado 3 Titular, (40 horas semanales / Dedicación total)

11/1991 - 11/1996, Vínculo: Profesor Adjunto de Química Cuántica. Efectiv, Docente Grado 4 Titular, (36 horas semanales / Dedicación total)

06/1976 - 06/1977, *Vínculo:* Ayudante Honorario, Docente Grado 1 Interino, (20 horas semanales)

08/1977 - 08/1978, *Vínculo:* Ayudante Honorario, Docente Grado 1 Interino, (20 horas semanales)

08/1977 - 12/1977, *Vínculo:* Ayudante, Docente Grado 1 Interino, (8 horas semanales)

04/1978 - 12/1979, *Vínculo:* Ayudante de Físicoquímica, Docente Grado 1 Interino, (15 horas semanales)

01/1983 - 12/1984, *Vínculo:* Asistente, Docente Grado 2 Interino, (24 horas semanales)

01/1986 - 12/1986, *Vínculo:* Prof. Adjunto de Química Cuántica, Docente Grado 3 Interino, (24 horas semanales)

01/1987 - 12/1987, *Vínculo:* Profesor Adjunto de Química Cuántica, Docente Grado 3 Interino, (24 horas semanales)

11/1989 - 11/1991, Vínculo: Profesor Adjunto de Química Cuántica. Efectiv, Docente Grado 1 Interino, (36 horas semanales / Dedicación total)

11/1996 - 11/2001, *Vínculo:* Profesor Adjunto de Química Cuántica. Efectiv, Docente Grado 1 Interino, (36 horas semanales / Dedicación total)

08/1997 - 08/1999, Vínculo: Profesor Agregado de Química Cuántica. Efecti, Docente Grado 1 Interino, (32 horas semanales / Dedicación total)

08/1999 - 08/2004, *Vínculo:* Profesor Agregado de Química Cuántica. Efecti, Docente Grado 1 Interino, (32 horas semanales / Dedicación total)

08/2004 - 08/2009, *Vínculo:* Profesor Agregado de Química Cuántica. Efecti, Docente Grado 1 Interino, (32 horas semanales / Dedicación total)

08/2009 - 05/2014, *Vínculo:* Profesor Agregado de Química Cuántica. Efecti, Docente Grado 1 Interino, (32 horas semanales / Dedicación total)

08/2014 - Actual, *Vínculo:* Profesor Titular, Docente Grado 5 Titular, (40 horas semanales / Dedicación total)

Actividades

10/2012 - Actual

Líneas de Investigación , Facultad de Química - UdeLaR , DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural

NUTRICAROT , Coordinador o Responsable

03/2010 - 00/

Líneas de Investigación , Facultad de Química , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

CREA.Estudio de la interacción con ADN de factores transcripcionales de *Aspergillus nidulans* , Coordinador o Responsable

06/2009 - 00/

Líneas de Investigación , Facultad de Química , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

FABLOCK. Estudios in silico de proteínas transportadoras de ácidos grasos de *Echinococcus granulosus* , Coordinador o Responsable

11/2004 - 00/

Líneas de Investigación , Facultad de Química - UdeLaR , DETEMA/Centro de Bioinformática Estructural

ABRESIST.Bioinformática estructural aplicada al estudio del mecanismo de resistencia de antibióticos quinolónicos , Coordinador o Responsable

03/2004 - 00/

Líneas de Investigación , Facultad de Química , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

NEURONACH.Bioinformática Estructural aplicada al estudio de interacción receptor-ligando para diferentes subtipos de receptores nicotínicos de acetil colina , Coordinador o Responsable

03/2003 - 00/

Líneas de Investigación , Facultad de Química - UdelaR , DETEMA / LabioFarMol
PROVITIS. Estudios experimentales e in silico de las propiedades antioxidantes de fenoles contenidos en productos naturales ,
Coordinador o Responsable

11/1993 - 00/

Líneas de Investigación , Facultad de Química - UdelaR , DETEMA/LaBioFarMol
CHAGASMEDCHEM-Diiseño de Candidatos a ser desarrollados como Antichagásicos. , Coordinador o Responsable

07/2007 - 12/2007

Docencia , Grado
Bioinformática Estructural , Química Farmacéutica

03/2004 - 08/2007

Docencia , Grado
Introducción a la Bioinformática , Química Farmacéutica

03/1976 - 03/1990

Docencia , Grado
Mecánica Cuántica , Química Farmacéutica

03/1978 - 03/1989

Docencia , Grado
Química Cuántica , Química Farmacéutica

03/1986 - 08/1986

Docencia , Grado
Simetría Molecular y Teoría de Grupos , Química Farmacéutica

03/1978 - 08/1978

Docencia , Grado
Espectroscopia Molecular , Química Farmacéutica

09/2013 - 12/2013

Docencia , Maestría
Bioinformática Estructural - Bioinformática II , Responsable , Maestría en Bioinformática

09/2011 - 12/2011

Docencia , Maestría
Bioinformática II , Organizador/Coordinador , Maestría en Bioinformática

9/2010 - 9/2010

Docencia , Maestría
NAMD-FEP , Organizador/Coordinador , Maestría en Bioinformática - PEDECIBA

6/2010 - 6/2010

Docencia , Maestría
NAMD , Organizador/Coordinador , Maestría en Bioinformática - PEDECIBA

09/2010 - 12/2010

Docencia , Maestría
Diseño de Compuestos Bioactivos , Responsable , Maestría en Bioinformática

04/2013 - 04/2013

Docencia , Especialización
Extracción, separación e identificación de carotenoides: carotenoides en alimentación, nutrición y salud , Organizador/Coordinador ,
Educación Permanente

3/2011 - 6/2011

Docencia , Especialización
Diseño de Compuestos Bioactivos , Organizador/Coordinador , Maestría en Bioinformática

6/2005 - 6/2005

Docencia , Especialización

"Minicurso Apiterapia" impartido durante el 1er Congreso de Apicultura del Mercosur. Punta del Este. 24-26 Junio 2005. , Invitado

2/2004 - 2/2004

Docencia , Especialización

2.2.3.1 "Farmacología y Modelado biomolecular aplicado al diseño de drogas para la enfermedad de Chagas". Febrero 2004. Centro de Capacitación y Perfeccionamiento Docente "Prof. Juan E. Pivel Devoto, Montevideo, Uruguay. , Invitado

12/2003 - 12/2003

Docencia , Especialización

"Investigación y desarrollo de fármacos antiprotozoarios: Estado Actual y nuevas Estrategias". Curso Regional Investigación y Desarrollo de Fármacos Antiprotozoarios: estado actual y nuevas estrategias". Diciembre- 2003 AMSUD-Pasteur. Montevideo , Invitado

03/1988 - 12/1990

Docencia , Especialización

Farmacología Cuántica , Química Farmacéutica

03/1988 - 08/1988

Docencia , Especialización

Investigación en el diseño de compuestos antichagásicos: Síntesis, estructura, bioquímica y teoría , Química Farmacéutica

12/1987 - 12/1987

Docencia , Especialización

"Diseño de Agentes Antichagásicos". Facultad de Química. 12-19 Diciembre 1987 , Organizador/Coordinador

3/2014 - Actual

Docencia , Doctorado

Diseño de Compuestos Bioactivos , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

03/2014 - Actual

Docencia , Doctorado

Taller de Simulaciones Biomoleculares , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

7/2013 - 7/2013

Docencia , Doctorado

Organizador/Coordinador , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

6/2013 - 6/2013

Docencia , Doctorado

Solving complex biological problems using free-energy calculations , Organizador/Coordinador , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

03/2013 - 06/2013

Docencia , Doctorado

Taller de Simulaciones Biomoleculares , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

03/2013 - 06/2013

Docencia , Doctorado

Diseño de Compuestos Bioactivos , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

5/2012 - 7/2012

Docencia , Doctorado

Diseño de Compuestos Bioactivos , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

3/2012 - 5/2012

Docencia , Doctorado

Taller de Simulaciones Biomoleculares , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

9/2012 - 12/2012

Docencia , Doctorado

Bioinformática Estructural - Bioinformática II , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

3/2010 - 6/2010

Docencia , Doctorado

Diseño de Compuestos Bioactivos , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

03/1998 - 08/2006

Docencia , Doctorado

Modelado Biomolecular , Doctorado en Química

9/1997 - 9/1997

Docencia , Doctorado

QUI.300-5.97 – Topics en Fisico-Química: Química Computacional aplicada al Modelagem Molecular (Módulo 2)". Universidad Federal de Sao Carlos. Septiembre 1997. , Invitado

5/1997 - 5/1997

Docencia , Doctorado

"Química Computacional Aplicada a Modelagem Molecular: uma introducao". Universidad Federal de Sao Carlos. Mayo 1997 , Responsable

11/1997 - 11/1997

Docencia , Doctorado

Mecánica, Dinámica y Farmacología Molecular, Reactividad Enzimática en Sitios Ativos". Noviembre 1997. Universidad Federal de Sao Carlos. , Invitado

10/1997 - 10/1997

Docencia , Doctorado

'Modelado Molecular". Universidad de Chile Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas. Octubre 1997 , Invitado

03/1991 - 08/1997

Docencia , Doctorado

Modelado Molecular , Doctorado en Química

8/1996 - 8/1996

Docencia , Doctorado

2.2.2.2.6 "Modelado Molecular". Universidad de Chile. Facultad de Ciencias. Agosto 1996 , Invitado

09/1996 - 09/1996

Docencia , Doctorado

2.2.2.2.5 "Introducción al Modelado Molecular". Universidad de Chile. Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas. Septiembre 1996 , Invitado

9/1998 - 9/1998

Docencia , Técnico nivel superior

"Estructura Biomacromolecular". Noviembre 1998. Dictado en el Ciclo de los Sábados para la Enseñanza de la Química y sus Aplicaciones. , Invitado

10/1989 - 10/1989

Docencia , Técnico nivel superior

"Diseño de fármacos asistido por computadoras". Octubre 1989. Curso Internacional de Química. Nivel Superior. En el marco del Centenario de la Asociación de Química y Farmacia del Uruguay. , Invitado

03/2014 - Actual

Extensión , Facultad de Química - UdeLaR , DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural

Envejeciendo sanamente.Campaña de sensibilización nutricional en el adulto mayor, fomentando el consumo de alimentos ricos en carotenoides que aportan beneficios en la salud.

03/2011 - 03/2012

Extensión , Facultad de Química , Centro de Bioinformática Estructural

Tutor del Proyecto de Extensión estudiantil PEB (Proyecto de Extensión en Bioinformática) realizado con el Liceo IPOLL de Salto

07/2011 - 12/2011

Extensión , Facultad de Química - PEDECIBA , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

Construir, mirar y transformar moléculas jugando. Proyecto de Extensión realizado en conjunto con la Estuela Numero 35 Guatemala de Montevideo

6/2013 - Actual

Gestión Académica , PEDECIBA , QUÍMICA

Coordinadora de la subárea Fisicoquímica

06/2011 - Actual

Gestión Académica , PEDECIBA , Maestría en Bioinformática
Coordinadora de la Maestría en Bioinformática

02/2011 - Actual

Gestión Académica , Facultad de Química - PEDECIBA , PEDECIBA Química
Titular por los investigadores de la Comisión Coordinadora del Área

03/2010 - Actual

Gestión Académica , Facultad de Química , Comisión de Dedicación Total
Titular por el orden Docente

03/2010 - Actual

Gestión Académica , PEDECIBA , Maestría en Bioinformática
Integrante Titular de la Comisión de Maestría

03/2010 - Actual

Gestión Académica , Facultad de Química , DETEMA
Representante titular por los G 3,4 y 5 del departamento

03/2010 - Actual

Gestión Académica , Facultad de Química , Claustro de la Facultad de Química
Titular por el orden Docente

06/2013 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - UdelaR , DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural
PROVITIS.NANO-Desarrollo y caracterización de un producto antiinflamatorio en base a liposomas de orujo de uvas , Coordinador o Responsable

03/2013 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - UdelaR , DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural
CHAGASMEDCHIM.QUINO- Paranaftoquinonas contra el Mal de Chagas , Coordinador o Responsable

03/2004 - 06/2011

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - UdelaR , DETEMA/LaBioFarMol
NEURONACH.CYT-Exploración de nuevos agonistas nicotínicos con selectividad por subtipo y modelización computacional de la interacción ligando-receptor , Integrante del Equipo

10/2008 - 10/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - UdelaR , DETEMA/LaBioFarMol
PROVITIS.DGIP-Investigación, desarrollo e innovación en base a propóleos y uvas: diseño de un concentrado polifenólico con propiedades protectoras contra el stress oxidativo. , Coordinador o Responsable

03/2008 - 06/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - UdelaR , DETEMA/LaBioFarMol
Investigación, desarrollo e innovación en base a vino tinto: diseño de un concentrado polifenólico con propiedades protectoras contra el stress oxidativo. , Coordinador o Responsable

01/2006 - 01/2007

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - UdelaR , DETEMA/LaBioFarMol
NEURODIABET.Modelización biomolecular: estudio de hormonas neuroendocrinas de interés en el área de salud, potenciales usos en el tratamiento de la obesidad y enfermedades neurodegenerativas , Integrante del Equipo

01/2005 - 01/2007

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - UdelaR , DETEMA/LaBioFarMol
PROPOLIS.CSIC-Flavonoides con propiedades antioxidantes extraídos de propóleos y marcela , Coordinador o Responsable

01/2001 - 01/2007

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - UdelaR , DETEMA/LaBioFarMol
CHAGASPACE:Structure based Drug Design and Evaluation of Trypanocidal natural compounds against Chagas Disease. , Coordinador o Responsable

01/1999 - 01/2001

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - UdelaR , DETEMA/LaBioFarMol
CHAGASMEDCHIM.SARECNET-Network for Research and Training in Parasitic Diseases at the Southern cone of Latin America. , Coordinador o Responsable

04/1994 - 04/1996

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - Udelar , DETEMA/LaBioFarMol

CHAGASMEDCHIM.CONICYT- Diseño de medicamentos antichagásicos selectivos , Coordinador o Responsable

06/1993 - 06/1995

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - Udelar , DETEMA/LaBioFarMol

CHAGASMEDCHIM.CSIC-Modelado Gráfico y Estudio de las Propiedades Dinámicas de Complejos Biomacromoleculares Relacionados con Enfermedades Parasitarias. , Coordinador o Responsable

01/1991 - 01/1995

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - Udelar , DETEMA/LaBioFarMol

CHAGASMEDCHIM.SAREC-Theoretical and Experimental Pharmacological Approach to Chagas Disease Specific Action of New Drugs Against Flavoenzyme of the Parasitic Related Organism and the Mammalian Host. , Coordinador o Responsable

08/1991 - 12/1993

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , DETEMA / LabioFarMol

CHAGASMEDCHIM.START-Diseño de nuevas drogas antichagásicas modelando su actividad frente a oxidoreductasas del metabolismo mamífero o parasitario , Coordinador o Responsable

03/2014 - 00/

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - Udelar , DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural

TARGETFISH.PHENOLS , Coordinador o Responsable

11/2011 - 00/

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - PEDECIBA , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

NEURONACH.HPC-GPC-MD , Coordinador o Responsable

03/2010 - 00/

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - PEDECIBA , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

NEURONACH.LBDD: diseño de nuevos compuestos a ser desarrollados como antiparkinsonianos basados en agonistas de receptores nicotínicos de acetil colina , Coordinador o Responsable

03/2010 - 00/

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

CreA: Estudios de interacciones ADN-proteína aplicados a proteínas de Aspergillus nidulans , Coordinador o Responsable

03/2009 - 00/

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

FABPLOCK: estudio de proteínas transportadoras de ácidos grasos en cestodes , Coordinador o Responsable

03/2008 - 00/

Proyectos de Investigación y Desarrollo , CeBioinfo - DETEMA - Facultad de Química - Udelar , PEDECIBA - Udelar

Maestría en Bioinformática , Coordinador o Responsable

Univ Catolica Del Norte , Univ Catolica Del Norte , Chile

[Vínculos con la institución](#)

03/2008 - 03/2010, *Vínculo:* Académico, (44 horas semanales / Dedicación total)

[Actividades](#)

03/2008 - 02/2010

Líneas de Investigación , Facultad de Ciencias , Departamento de Química y Farmacia

PROVITIS. Estudio de las propiedades antioxidantes de productos naturales autóctonos de Chile y Uruguay , Coordinador o Responsable

03/2008 - 02/2010

Líneas de Investigación , Facultad de Ciencias , Departamento de Física

NEURO.UCN-Bioinformática Estructural aplicada a enfermedades neurodegenerativas , Coordinador o Responsable

03/2008 - 03/2010

Docencia , Grado

Farmacología II

03/2008 - 03/2010

Docencia , Grado

Química Farmacéutica III

03/2008 - 03/2010

Docencia , Grado

Bioinformática Estructural

03/2008 - 03/2010

Docencia , Grado

Farmacología I

03/2008 - 03/2010

Docencia , Grado

Farmacología III

03/2008 - 03/2010

Otra actividad técnico-científica relevante , Universidad Católica del Norte - CHILE , Facultad de Ciencias

Especialista convocada para consolidar enseñanza, investigación y extensión en Química Farmacéutica, bajo un proyecto financiado por un programa del MECESUP(Programa de Mejoramiento de la Calidad y Equidad de la Educación Superior) - CHILE

03/2008 - 03/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Departamento de Química y Farmacia

PROVITIS-MEL , Coordinador o Responsable

03/2008 - 03/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Departamentos de Química y Física

CQTEQUINAS.UCN-Catequinas de plantas autóctonas uruguayas y chilenas , Integrante del Equipo

03/2008 - 03/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Departamento de Química y Farmacia y Física

VITIS.UCN-MEL-Desarrollo de antioxidantes a partir de vinos chilenos , Coordinador o Responsable

03/2008 - 03/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Departamentos de Química, Química y Farmacia y Física

PROVITIS.DGIP-Investigación, desarrollo e innovación en base a propóleos y vino tinto: diseño de un concentrado polifenólico con propiedades protectoras contra el stress oxidativo , Coordinador o Responsable

Lineas de investigación

Título: ABRESIST.Bioinformática estructural aplicada al estudio del mecanismo de resistencia de antibióticos quinolónicos

Tipo de participación: Coordinador o Responsable

Objetivo: Estudio de las bases moleculares de la resistencia de antibióticos quinolónicos, mediante el diseño de proteínas transmembranales de *Neisseria gonorrhoeae* y la dilucidación de factores determinantes de la unión y reflujo hacia el exterior de las bacterias, de dichas moléculas.

Equipos: Ana Acevedo(Integrante); Graciela Borthagaray(Integrante)

Palabras clave: bioinformática estructural; resistencia a antibióticos quinolónicos

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Título: CHAGASMEDCHEM-Diseño de Candidatos a ser desarrollados como Antichagásicos.

Tipo de participación: Coordinador o Responsable

Objetivo: CHAGASMEDCHEM.Diseño de moléculas candidatas a ser empleadas como quimioterápicos de la Enfermedad de Chagas, en base al estudio de mecanismos enzimáticos de defensa contra el stress oxidativo de parásitos y huéspedes. Desarrollo de formas farmacéuticas (nanoestructuras) conteniendo extractos de productos naturales con actividades antitripanosoma. Estudios de la expresión en *T. cruzi* de ciclofilina y su relación con inhibidores análogos de ciclosporina. Modelado tridimensional y validación de la estructura de: proteína nucleosomal del cromosoma de *Trypanosoma cruzi*, transalidasa y dehidrogenasa de alfa-aminoácidos hidroxilados aromáticos (AHADH)

Equipos: Marta Dubin(Integrante); Elena Alvareda(Integrante); Sara Aguilera(Integrante); Federico Iribarne(Integrante); Pablo Denis(Integrante); Roberto Carraro(Integrante); Jackeline Búa(Integrante); Orlando Tapia(Integrante); Hugo Cerecetto(Integrante); Helena Pardo(Integrante); Ricardo Tapia(Integrante); Karina Vazquez(Integrante); Mercedes Gonzáles(Integrante); Cristian Salas(Integrante)

Palabras clave: Chagas, nuevos fármacos; bioinformática estructural

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Título: CREA.Estudio de la interacción con ADN de factores transcripcionales de *Aspergillus Nidulans*

Tipo de participación: Coordinador o Responsable

Objetivo: Estrategias in silico para el modelado biomolecular del factor transcripcional CreA y su unión a ADN. A partir del modelo tridimensional de CreA y un conjunto de mutantes, unidos a ADN, se realizan simulaciones de dinámica molecular en fase acuosa. El análisis del comportamiento simulado de los complejos en solución permite inferir patrones de contacto proteína-ADN y medir energías de interacción. Tales medidas se pueden correlacionar con medidas experimentales de unión proteína-ligando realizadas por investigadores que pertenecen a nuestro equipo de trabajo

Equipos: Patricia Esperón(Integrante); Claudio Scazzocchio(Integrante)

Palabras clave: CreA; ADN

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

Título: FABLOCK. Estudios in silico de proteínas transportadoras de ácidos grasos de *Echinococcus granulosus*

Tipo de participación: Coordinador o Responsable

Objetivo: Las estrategias de simulación in silico: modelado biomolecular, anclaje, dinámica molecular son aplicadas para dilucidar la estructura tridimensional y comportamiento en solución de proteínas transportadoras de ácidos grasos descubiertas a partir del genoma del *Echinococcus granulosus*. A partir de estas investigaciones, se puede predecir la estructura tridimensional de proteínas hasta ahora desconocida, proponer sus modos y especificidad de unión a ligandos ácidos grasos y estudiar otras posibles funcionalidades como el disparo de señales de localización nuclear.

Equipos: Adriana Estéves(Integrante)

Palabras clave: FABPs

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

Título: NEURO.UCN-Bioinformática Estructural aplicada a enfermedades neurodegenerativas

Tipo de participación: Coordinador o Responsable

Objetivo: Estudios in silico de receptores asociados a enfermedades neurodegenerativas

Equipos: Andres Abin(Integrante); Bruce Cassels(Integrante); Federico Dajas(Integrante); Floria Panzetti(Integrante)

Palabras clave: receptores nicotínicos; citisinoides; parkinson; problemas cognitivos; alzheimer

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de drogas antiparkinsonianas

Título: NEURONACH.Bioinformática Estructural aplicada al estudio de interacción receptor-ligando para diferentes subtipos de receptores nicotínicos de acetil colina

Tipo de participación: Coordinador o Responsable

Objetivo: Existe un creciente interés en el desarrollo de agonistas para nAChRs neuronales debido a su potencial terapéutico como analgésicos y para el tratamiento de diferentes desordenes neurológicos y psiquiátricos relacionados con la alteración de la función colinérgica. Sin embargo, su potencial terapéutico, generalmente vinculado a la estimulación de los subtipos A4B2 y A7, como por ejemplo el diseño de nuevos fármacos antiparkinsonianos, está acompañado de una variedad de efectos secundarios no deseados, asociados fundamentalmente a la estimulación de los nAChRs ganglionares (principalmente A3B4). En este sentido el desarrollo de herramientas farmacológicas capaces de discriminar los diferentes subtipos de nAChRs abre la posibilidad de desarrollar nuevos agentes terapéuticos que eviten o disminuyan los efectos no deseados. La reciente publicación en el Protein Data Bank del modelo cristalográfico del complejo nicotina - proteína de unión de acetilcolina de caracol, abre la posibilidad de generar modelos computacionales de los diferentes subtipos de nAChRs neuronales y con éstos, calcular las energías de unión de diferentes estructuras moleculares. Por otra parte, existe una gran cantidad de datos experimentales que permiten construir bases de datos de constantes de afinidad tanto para A7 como para A4B2 de distintos derivados de los agonistas prototípicos ((-)-Nicotina, (-)-Citisina, (-)-Anatoxina-A y (-)-Epibatidina). En este contexto, el proyecto se enfoca hacia la modelización de la interacción receptor-ligando para diferentes subtipos de nAChRs, de manera tal que nos permita predecir la afinidad y especificidad de los diferentes ligandos y así, a través de un tamizaje virtual, proponer nuevos compuestos candidatos capaces de discriminar entre los diferentes nAChRs en estudio.

Equipos: Federico Dajas(Integrante); Federico Iribarne(Integrante); Gustavo Silva(Integrante); Juan Andrés Abin(Integrante); Bruce K. Cassels(Integrante); Susan Wonnacott(Integrante); Yamandú González(Integrante); Pablo Ezzati(Integrante); Christophe Chipot(Integrante); Francois Dehez(Integrante); Timothy Galagher(Integrante)

Palabras clave: nAChR; enfermedades neurodegenerativas; nicotina; citisina; anatoxina; fármaco, QSAR, docking, MD, FEP

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

Título: NUTRICAROT

Tipo de participación: Coordinador o Responsable

Objetivo: CAROT. Estrategias in silico, in vitro y empresariales aplicada a la modelización, análisis conformacional, isomería estructural de carotenoides y su implicancia en las interacciones y propiedades "in vivo" y al desarrollo de un nutraceutico en base a carotenoides

Equipos: Adriana Gambaro(Integrante); Antonio Melendez(Integrante); Mauricio Vega(Integrante); Robert Rodriguez(Integrante); Carolina Lopez(Integrante); Maria Jesus Rodrigo(Integrante); Valentina Velazquez(Integrante); Carla Stinco(Integrante)

Título: PROVITIS. Estudio de las propiedades antioxidantes de productos naturales autóctonos de Chile y Uruguay

Tipo de participación: Coordinador o Responsable

Objetivo: Extracción de fenoles a partir de propóleos, uvas y productos obtenidos de ellas uruguayos y chilenos. Desarrollo de procesos extractivos, y analíticos del contenido y capacidad antioxidante por diferentes metodologías (Folin Ciolcateu, HPLC, HPLS-MSÍndice de oxidación, DPPH, ABTS+) y enzimológicas (inhibición de enzimas claves de enfermedades : xantina oxidasa, COXII, COXI, LOX y FOS2). Estudios LBDD y SBDD de las estructuras y actividades.

Equipos: Patricia Pozo(Integrante); Pablo Carmona(Integrante); Yisel Rodríguez(Integrante); Marcello Asencio(Integrante); Victoria Espinosa(Integrante); Miguel Reyes(Integrante); Víctor Kesternich(Integrante); Susana Stegen(Integrante); Sara Aguilera(Integrante); Alejandra Rodríguez(Integrante); Hrvoj Hrzich(Integrante)

Palabras clave: antioxidantes, propóleos, QSAR; antiinflamatorios; antigotosos

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Antioxidantes, QSAR, Bioinformática Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

Título: PROVITIS. Estudios experimentales e in silico de las propiedades antioxidantes de fenoles contenidos en productos naturales

Tipo de participación: Coordinador o Responsable

Objetivo: PROVITIS.El objetivo principal de esta línea de investigación es el estudio y obtención a escala piloto, de un concentrado patentado de polifenoles a partir de propóleos y uvas, cuyo contenido fenólico y capacidad antioxidante estarán documentados y certificados. Se están realizando los análisis de polifenoles totales en muestras vino tinto y propóleos, de capacidad antioxidante mediante técnicas de DPPH y ABTS+, obtención de un concentrado de vino tinto patentado (contenido fijo de polifenoles totales), de un extracto hidro etanólico de propóleos por método de extracción a reflujo (Soxhlet), mezcla de concentrados y extractos y monitoreo del contenido final de polifenoles y capacidad antioxidante de los concentrados obtenidos. En paralelo a los estudios de laboratorio húmedo, se realizan medidas de docking y dinámica molecular en modelos contruidos a partir de datos cristalográficos de las enzimas ciclooxigenasa II y xantina oxidasa, asociadas a los mecanismos de inflamación y gota, respectivamente. Se estudian los modos y energías de interacción de los fenoles contenidos en los extractos obtenidos con estas dos enzimas, con el fin de brindarle a los extractos un valor agregado adicional, que indique probables acciones antiinflamatorias y antigotosas. Esta es una línea multidisciplinaria que integra además el desarrollo de productos liposomados, en coordinación con el Nanomat del Polo Tecnológico de Pando, y del análisis de sus propiedades sensoriales, en coordinación con el Laboratorio de Análisis sensorial del Departamento de Alimentos de la Facultad de Química.

Equipos: Pablo Miranda(Integrante); Marta Dubin(Integrante); Sara Aguilera Morales(Integrante); Pablo Carmona(Integrante); Alejandra Rodríguez(Integrante); Loreto Calderón(Integrante); Marcela Pearce(Integrante); Antonella Roascio(Integrante); Elena Alvareda Migliaro(Integrante); Cristhian Rojas(Integrante); Adriana Gambaro(Integrante); Helena Pardo(Integrante); Guillermo Moyna(Integrante)

Palabras clave: antioxidantes; propóleos; fenoles; uvas; liposomas; ciclooxigenasa, xantina oxidasa

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Proyectos

2013 - Actual

Título: CHAGASMEDCHIM.QUINO- Paranaftoquinonas contra el Mal de Chagas, **Tipo de participación:** Coordinador o Responsable, **Descripción:** Este proyecto es el más reciente emprendimiento de investigación que continúa la búsqueda de nuevos candidatos para ser desarrollados contra el Mal de Chagas. Su objetivo general es el diseño de nuevos candidatos para el desarrollo de medicamentos contra el Mal de Chagas. Sus objetivos específicos incluyen síntesis de series de paranaftoquinonas, tamizaje virtual, estudios parasitológicos, bioquímicos, cristalográficos y propuestas de nuevos candidatos a ser desarrollados como medicamentos para el Mal de Chagas.

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Doctorado)

Equipo: Hugo Cerecetto(Integrante); Ricardo Tapia(Integrante); Cristian Salas(Integrante); Mercedes Gonzalez(Integrante); Karina(Integrante); Louise Krauth-Siegel(Integrante)

Financiadores: Universidad de la República / Cooperación

Pontificia Universidad Católica de Chile / Cooperación

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Palabras clave: chagas; quinonas

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

2010 - Actual

Título: CreA: Estudios de interacciones ADN-proteína aplicados a proteínas de *Aspergillus nidulans*, **Tipo de participación:** Coordinador o Responsable, **Descripción:** Este proyecto se inscribe en la línea DNA-PROT cuyo objetivo general consiste en estudiar la interacción de la proteína CreA, del hongo *Aspergillus nidulans* con ADN. Como objetivos específicos tiene principalmente dos: uno es el estudio por métodos experimentales de laboratorio húmedo la interacción de CreA y un conjunto de mutantes, con un oligonucleótido de 10 pares de bases. El segundo objetivo consiste en modelizar la estructura tridimensional de CreA y todos los mutantes a partir de el mismo modelo y realizar simulaciones de dinámica molecular de largo alcance de tales proteínas unidas a un modelo de oligómero. Finalmente, a través del estudio comparado de los valores de constantes de afinidad y de la estructura de los modelos de complejos y las energías de interacción calculadas, se investiga sobre las bases moleculares que definen el patrón de interacción y las diferentes fuerzas que operan entre proteína y ADN

Tipo: Investigación

Alumnos:

Equipo: Patricia Esperón(Integrante); Claudio Scazzocchio(Integrante)

Financiadores: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Otra

Palabras clave: ADN interacciones; factores transcripcionales; Aspergillus nidulans

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biología molecular

2009 - Actual

Título: FABPLOCK: estudio de proteínas transportadoras de ácidos grasos en cestodes, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* El Proyecto, incluido en la línea de investigación del mismo nombre, tiene como objetivo general la profundización en el conocimiento de la función de las FABPs de Echinococcus granulosus e identificación de blancos potenciales para diagnosis, desarrollo de drogas y vacunas. Como objetivos específicos: Rastreo de antagonistas de las EgFABPs mediante técnicas in silico, in vitro y posterior comprobación in vivo.

Tipo: Investigación

Alumnos:

Equipo: Adriana Estéves(Integrante)

Financiadores: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Otra

Palabras clave: cestodes FABPs; Echinococcus granulosus; dinámica molecular; docking; ácidos grasos

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biología molecular

2008 - Actual

Título: Maestría en Bioinformática, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* La Maestría en Bioinformática tiene como objetivos: Formación de RRHH de nivel de posgrado en Bioinformática y promoción de la interacción entre investigadores de las distintas vertientes que componen la Bioinformática. -Sustentar la formación de profesionales bioinformáticos de alto nivel tendiente a la formación de una plataforma de alto nivel en esta área de conocimiento. -Promoción de la interacción entre los centros académicos formadores de RRHH y los sectores empresariales (ej. industria Biotecnológica) generadores de demanda con vista a la futura inserción laboral.

Tipo: Otra

Alumnos: 42(Maestría/Magister),

Equipo: Federico Iribarne(Integrante); Mauricio Vega(Integrante); Alvaro Momburu(Responsable); Margot Paulino(Responsable); Mariela Torre(Integrante); F Alvarez Valin(Integrante); Pablo Ezzatti(Integrante); Dina Wonsever(Integrante); Hugo Naya(Integrante); Jose Tort(Integrante); Enrique Lessa(Integrante); Jose Sotelo(Integrante); Beatriz Garat(Integrante); Marco Scavino(Integrante); Pablo Garcia(Integrante); Alfonso Vicente(Integrante); Gustavo Guerberoff(Integrante); Ivana Nuñez(Integrante); Paula Bermolen(Integrante); Pablo Smircich(Integrante); Mercedes Gonzalez(Integrante); Leonardo Moreno(Integrante)

Financiadores: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero

Comisión Académica de Posgrado / Apoyo financiero

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Palabras clave: Bioinformática; Maestría

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

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

2011 - Actual

Título: NEURONACH.HPC-GPC-MD, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* El Proyecto, diseñado en el marco de la línea de investigación NEURONACH, consiste en desarrollar estrategias de High Performance Computing utilizando arquitecturas que incluyan Graphics Unity Processors (GPUs) para llevar a cabo dinámicas moleculares de largo alcance de sistemas complejos incluyendo proteínas membranas y solvente. La aplicación de tal estrategia será realizada a modelos de receptores nicotínicos de acetil colina humanos.

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Maestría/Magister),

Equipo: Yamandú González(Integrante); Pablo Ezzati(Integrante)

Financiadores: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Otra

Palabras clave: HPC GPUs; nAChR; dinámica molecular

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / High Performance Computing

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

2010 - Actual

Título: NEURONACH.LBDD: diseño de nuevos compuestos a ser desarrollados como antiparkinsonianos basados en agonistas de receptores nicotínicos de acetil colina, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* El proyecto se basa en investigaciones desarrolladas previamente por nuestro grupo de investigación, en el marco de la línea de investigación NEURONACH. La propuesta se basa en el antecedente de que los receptores neuronales nicotínicos de acetilcolina son blancos terapéuticos promisorios para el desarrollo de nuevas herramientas farmacológicas para el tratamiento de diversos desórdenes neurológicos. Los receptores del subtipo $\alpha 4\beta 2$ son los más relevantes debido su abundancia y distribución, así como por las funciones fisiológicas que ellos modulan. Si bien se posee información sobre las características que hacen potente a un agonista nicotínico, no hay demasiadas evidencias a nivel estructural que puedan justificar tal comportamiento. Las estrategias de filtrado virtual a partir de bases de la base de datos Pubchem, dilucidación de farmacóforo y análisis cuantitativo estructura-actividad (QSAR), combinadas, permiten analizar en forma gráfica y estadística el tipo de propiedades asociadas a la estructura (descriptores) que puedan estar vinculados a la actividad.

Tipo: Investigación

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

Equipo: Andres Abin(Integrante); Gustavo Silva(Integrante); Andrés Milano(Integrante)

Financiadores: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Otra

Palabras clave: antiparkinsonianos; Ligand Based drug design

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

2013 - Actual

Título: PROVITIS.NANO-Desarrollo y caracterización de un producto antiinflamatorio en base a liposomas de orujo de uvas, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable,

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Pregrado),

Equipo: Pablo Miranda(Integrante); Helena Pardo(Integrante)

Financiadores: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca
Universidad de la República / Remuneración

Palabras clave: liposomas; antiinflamatorios

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

2014 - Actual

Título: TARGETFISH.PHENOLS, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable,

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Maestría/Magister),

Financiadores: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca
Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Beca

Palabras clave: fenoles; quercetina

1991 - 1993

Título: CHAGASMEDCHIM.START-Diseño de nuevas drogas antichagásicas modelando su actividad frente a oxidoreductasas del metabolismo mamífero o parasitario, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Esta propuesta fue la primera de un conjunto de proyectos que conforman hasta la actualidad la línea de investigación CHAGASMEDCHIM, dedicada a modelado y estudio por métodos in silico, de series de estructuras moleculares que pudieran luego de su selección a través de nuestra investigación, ser sugeridas como candidatos para el desarrollo de drogas antichagásicas. Las enzimas clave utilizadas para tal fin fueron oxidoreductasas del metabolismo mamífero o parasitario, y especialmente tripanotona y glutatión reductasa.

Tipo: Investigación

Alumnos: 2(Pregrado), 2(Especialización), 2(Maestría/Magister prof.),

Equipo: Orlando Tapia(Integrante); Andrés Oscar Manuel Stoppani(Integrante); Noriko Hikichi(Integrante); María Hansz(Integrante)

Financiadores: Otra institución nacional / Universidad de la República / Apoyo financiero

Palabras clave: Antichagásicos

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

1993 - 1995

Título: CHAGASMEDCHIM.CSIC-Modelado Gráfico y Estudio de las Propiedades Dinámicas de Complejos Biomacromoleculares Relacionados con Enfermedades Parasitarias. , *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Este proyecto forma parte de una serie de propuestas englobadas en un objetivo único que es el estudio in silico de biomoléculas asociadas a enfermedades parasitarias. En este caso, se desarrollaron las metodologías y protocolos para el modelado Gráfico y estudio mediante Dinámica Molecular de Complejos Biomacromoleculares Relacionados con Enfermedades Parasitarias. Ejemplo de ello: modelado y estudio de interacciones entre enzimas claves como tripanotona reductasa y glutatión reductasa, y sus sustratos naturales (tripanotona y glutatión).

Tipo: Desarrollo

Alumnos: 2(Pregrado), 2(Especialización), 1(Doctorado)

Equipo: Orlando Tapia(Integrante); Andrés Oscar Manuel Stoppani(Integrante); Noriko Hikichi(Integrante); María Hansz(Integrante)

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

Palabras clave: Antichagásicos

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

1991 - 1995

Título: CHAGASMEDCHIM.SAREC-Theoretical and Experimental Pharmacological Approach to Chagas Disease Specific Action of New Drugs Against Flavoenzyme of the Parasitic Related Organism and the Mammalian Host. , *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Este fue el primero de nuestros emprendimientos dedicados al desarrollo de nuevas drogas antichagásicas. Se organizaron bases de datos, conteniendo estructuras moleculares con información de actividades antitripanosoma (como nitrofuranos), se calcularon y midieron sus propiedades físicoquímicas y se realizaron estudios de la correlación estructura-actividad (QSAR). También, se implementaron las metodologías para el estudio gráfico y simulación de enzimas claves implicadas en los mecanismos tripanocidas, en este caso, en los mecanismos de stress oxidativo parásito y mamífero, como lo son la tripanotona reductasa y la glutatión reductasa, respectivamente. Finalmente, se implementaron los estudios dirigidos a conocer la forma de unión de las drogas ya estudiadas por QSAR y las enzimas claves antes mencionadas, generándose complejos biomacromoleculares que se sometieron a estudios de anclaje (docking) y dinámica molecular.

Tipo: Investigación

Alumnos: 3(Pregrado), 2(Especialización), 1(Maestría/Magister prof.), 1(Doctorado)

Equipo: Orlando Tapia(Integrante); Andrés Oscar Manuel Stoppani(Integrante); Noriko Hikichi(Integrante); María Hansz(Integrante)

Financiadores: Institución del exterior / SAREC / Apoyo financiero

Palabras clave: Antichagásicos

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

1994 - 1996

Título: CHAGASMEDCHIM.CONICYT- Diseño de medicamentos antichagásicos selectivos, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Estudios de la relación estructura actividad de compuestos nitrofuránicos en las enzimas clave tripanotona y glutatión reductasa, utilizando herramientas de bioinformática estructural

Tipo: Investigación

Alumnos: 2(Pregrado), 2(Especialización), 1(Maestría/Magister prof.),

Equipo: Federico Iribarne(Integrante); Orlando Tapia(Integrante); Andrés Oscar Manuel Stoppani(Integrante); Noriko Hikichi(Integrante); María Hansz(Integrante)

Financiadores: DINACYT/DICYT/CONICYT / Apoyo financiero

Palabras clave: Antichagásicos

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

1999 - 2001

Título: CHAGASMEDCHIM.SARECNET-Network for Research and Training in Parasitic Diseases at the Southern cone of Latin America. , *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Este emprendimiento fue desarrollado en base a la cantidad de recursos humanos especializados en el estudio de enfermedades parasitarias que se generaron durante la ejecución del proyecto anteriormente financiado por SAREC. En este caso, se consolidó una Red Temática para la formación de nuevos recursos humanos que pudieran seguir colaborando en el área de las enfermedades parasitarias en el cono Sur de Latino América.

Tipo: Investigación

Alumnos:

Financiadores: Institución del exterior / SAREC / Cooperación

Palabras clave: parasitos

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

2001 - 2007

Título: CHAGASPACE: Structure based Drug Design and Evaluation of Trypanocidal natural compounds against Chagas Disease. , *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Este proyecto, ag inscripto dentro de la línea de investigación CHAGASMEDCHIM, agrupó nuevas instituciones de diferentes países, a saber: Universidad Nacional de Costa Rica, Universidad EARTH (Costa Rica), Universidad de Birmingham, Alabama (USA), NASA (USA), Universidad de Santiago de Chile (UsaCh), Universidad Católica del Norte (UCN), Chile, Instituto Mario Fátala Chabén (Buenos Aires, Argentina) y la Universidad de la República (UdelaR). Se realizó un convenio multinacional a través del cual se desarrollaron investigaciones de búsqueda de nuevos compuestos activos contra la enfermedad de Chagas. Se realizaron 'screenings' en las selva húmeda de Costa Rica y en el desierto de Atacama en Chile. Dichos extractos se analizaron en relación a su capacidad inhibitoria del crecimiento del parásito causante de la enfermedad de Chagas (T. cruzi), y de una enzima clave del stress oxidativo del tripanosoma, la tripanotona reductasa (TR). También, se realizaron estudios in silico de moléculas con actividad inhibitoria en TR y su contraparte mamífera, la glutatión reductasa (GR). Se realizaron reuniones anuales en las cuales los resultados fueron discutidos y los planes rediseñados.

Tipo: Investigación

Alumnos: 3(Pregrado), 2(Maestría/Magister prof.), 2(Doctorado)

Equipo: Elena Alvareda(Integrante); Sara Aguilera(Integrante); Federico Iribarne(Integrante); Roberto Carraro(Integrante); Orlando Tapia(Integrante); Ana García(Integrante); Larry De Lucas(Integrante); Bert Kohlman(Integrante); Silvia Sepúlveda(Integrante)

Financiadores: Institución del exterior / National Aeronautics and Space Administration / Apoyo financiero

Palabras clave: Antichagásicos; Biodiversidad; tripanotona reductasa

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de drogas

Sistema Nacional de Investigadores

2006 - 2007

Título: NEURODIABET. Modelización biomolecular: estudio de hormonas neuroendocrinas de interés en el área de salud, potenciales usos en el tratamiento de la obesidad y enfermedades neurodegenerativas , *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Este proyecto consistió en simular mediante dinámica molecular en medio acuoso con una concentración de iones equivalentes a la del pH fisiológico, la estructura pequeñas hormonas neuroendocrinas, que son péptidos entre 30 y 40 , implicadas en la acción glucoreguladora, siendo por ello potenciales agentes terapéuticos en el control de diabetes y obesidad.

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Especialización),

Equipo: Cristina Donnamaría(Responsable)

Financiadores: Institución del exterior / Comisión de Investigaciones Científicas / Apoyo financiero

Palabras clave: diabetes; obesidad; hormona neuroendocrina

2005 - 2007

Título: PROPOLIS.CSIC-Flavonoides con propiedades antioxidantes extraídos de propóleos y marcela, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* La propuesta, incluida dentro de la línea de investigación PROVITIS, fue realizada en asociación con el Sector Productivo uruguayo (empresa TEPYVE, Sociedad Apícola Uruguaya, Fundación Zonamérica) consistió en la extracción de fenoles de propóleos y marcela y estudio de sus estructuras y propiedades antioxidantes.

Tipo: Investigación

Alumnos: 3(Pregrado), 1(Maestría/Magister),

Equipo: Marta Dubin(Integrante); Elena Alvareda(Integrante); Sara Aguilera(Integrante); Manuel Cedrés(Integrante); Loreto Calderón(Integrante); Christian Rojas(Integrante)

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

Palabras clave: antioxidantes; propóleos

Sistema Nacional de Investigadores

2008 - 2010

Título: CQTEQUINAS.UCN-Catequinas de plantas autóctonas uruguayas y chilenas, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Extracción de catequinas a partir de plantas autóctonas uruguayas y chilenas. Desarrollo de procesos extractivos y analíticos de contenido y capacidad antioxidantes. estudio del efecto de los extractos a nivel del metabolismo endógeno y sometido a situaciones patológicas

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Pregrado),

Equipo: Victor Kesternich(Responsable); Manuel Navero(Integrante)

Financiadores: Institución del exterior / Facultad de Ciencias / Otra

Palabras clave: catequinas; plantas autóctonas

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

2008 - 2010

Título: VITIS.UCN-MEL-Desarrollo de antioxidantes a partir de vinos chilenos, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* El proyecto tuvo como objetivo el desarrollo de extractos de productos naturales con alto valor agregado. Como actividades específicas tuvo: extracción de fenoles a partir de mezclas de vinos chilenos. Desarrollo de procesos extractivos, y analíticos del contenido y capacidad antioxidante por diferentes metodologías (Folin Ciolcateu, HPLC, HPLS-MS Índice de oxidación, DPPH, ABTS+) y enzimológicas (inhibición de enzimas claves de enfermedades : xantina oxidasa, COXII, COXI, LOX y FOS2). Estudios LBDD y SBDD de las estructuras y actividades.

Tipo: Investigación

Alumnos: 3(Pregrado),

Equipo: Sara Aguilera Morales(Integrante); Yisel Rodriguez(Integrante); Victor Kesternich(Integrante); Manuel Navero(Integrante); Katherine Avalos(Integrante); Ronald Nelson(Integrante)

Financiadores: Institución del exterior / Minera Escondida Ltda / Apoyo financiero

Palabras clave: vinos chilenos; antioxidantes

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

2004 - 2011

Título: NEURONACH.CYT-Exploración de nuevos agonistas nicotínicos con selectividad por subtipo y modelización computacional de la interacción ligando-receptor, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Existe un creciente interés en el desarrollo de agonistas para nAChRs neuronales debido a su potencial terapéutico como analgésicos y para el tratamiento de diferentes desordenes neurológicos y psiquiátricos relacionados con la alteración de la función colinérgica. Sin embargo, su potencial terapéutico, generalmente vinculado a la estimulación de los subtipos A4B2 y A7, está acompañado de una variedad de efectos secundarios no deseados, asociados fundamentalmente a la estimulación de los nAChRs ganglionares (principalmente A3B4). En este sentido el desarrollo de herramientas farmacológicas capaces de discriminar los diferentes subtipos de nAChRs abre la posibilidad de desarrollar nuevos agentes terapéuticos que eviten o disminuyan los efectos no deseados. La reciente publicación en el Protein Data Bank del modelo cristalográfico del complejo nicotina - proteína de unión de acetilcolina de caracol, abre la posibilidad de generar modelos computacionales de los diferentes subtipos de nAChRs neuronales y con éstos, calcular las energías de unión de diferentes estructuras moleculares. Por otra parte, existe una gran cantidad de datos experimentales que permiten construir bases de datos de constantes de afinidad tanto para A7 como para A4B2 de distintos derivados de los agonistas prototípicos ((-)-Nicotina, (-)-Citisina, (-)-Anatoxina-A y (-)-Epibatidina). En este contexto, el proyecto se enfoca hacia la modelización de la interacción receptor-ligando para diferentes subtipos de nAChRs, de manera tal que nos permita predecir la afinidad y especificidad de una serie de ligandos sintetizados con estructuras análogas a las (-) citisina la cual además fue tomada como prototipo para un tamizaje virtual que permitió proponer nuevos compuestos candidatos capaces de discriminar entre los diferentes nAChRs en estudio.

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Doctorado)

Equipo: Andres Abin(Responsable); Federico Dajas(Integrante)

Financiadores: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Cooperación

Palabras clave: nicotínicos

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

Producción científica/tecnológica

Me desempeño en actividades de investigación, desarrollo, innovación y extensión que vinculan áreas multidisciplinares como Bioinformática, Farmacoquímica, Ciencias de la vida e Informática. Instalé y dirijo el Centro de Bioinformática Estructural (CeBioinfo) del DETEMA-Facultad de Química-UdelaR, cuya función principal es la implementación de estrategias in silico y experimentales para la investigación, desarrollo e innovación de nuevos fármacos y macromoléculas biológicas asociadas a la salud humana. Investigo en el Diseño de Biomoléculas y Compuestos Bioactivos estudiando su estructura y propiedades fisicoquímicas para ser desarrollados como fitonutrientes, fitofármacos o fármacos para enfermedades bacterianas, micosis, parasitarias (Chagas, Toxoplasmosis), Cáncer, Gota, Inflamación, neurodegenerativas (Parkinson, Alzheimer, Problemas Cognitivos). Desarrollamos conocimiento sobre antioxidantes (fenoles, carotenoides) extraídos de productos naturales, aportando respuestas a su relación con los desbalances del stress oxidativo, enfermedades oculares y nutricionales. Sostenemos vínculos académicos regionales e internacionales: En Uruguay, con el IIBCE, Facultades de Química, Ciencias, Ingeniería e Institut Pasteur Montevideo. En Chile: USaCh, UChile, UCN, PUC, UAB. En Argentina: CIBIERG/UBA, Instituto de Parasitología Fátala Chabén. En Brasil FIOCRUZ y UFRJ; Costa Rica: EARTH; Suecia: U Uppsala; Francia: U Paris Sud. En Estados Unidos: U Birmingham-Alabama; Irlanda Trinity College Dublin; Alemania: Univ. Braunschweig, Berlin, OMS-PAHO. España:red CYTED IBERCAROT, Universidad de Sevilla, CSIC(Valencia), UK: University of Liverpool Realizamos

innovación y desarrollo con empresas uruguayas y chilenas: TEPYVE; Fundación Zonamérica; Sociedad Apícola Uruguaya; Red Apícola; Exportadores de Miel y Propóleos (Urimpex S.A.); DIPRODE, Cluster Apícola; Empresas Vitivinícolas (Loncomilla-San Javier -Chile, Carrau, productores), Bodegas Carrau y Boido, entre otras. Con sectores académicos y empresariales, nacionales e internacionales hemos gestionado y participamos en proyectos de investigación, desarrollo e innovación financiados por fuentes nacionales e internacionales. Soy responsable por la formación de recursos humanos, tarea altamente gratificante, tanto por la docencia directa como dirigiendo Tesis de grado y postgrado (4 doctorados, 2 maestrías y 4 grados finalizados, 4 postgrados y 4 grados en realización). Participo del cogobierno universitario: Directora Suplente DETEMA; Suplente por el orden docente del Consejo de la Facultad de Química, Titular Comisión de Dedicación Total y COAED. S y Comisión Coordinadora del Area(CCA)-Química- PEDECIBA, Coordinadora de cursos de postgrado-fisicoquímica y Comisiones de ingresos. Coordino la Maestría en Bioinformática UdelaR-PEDECIBA desde el 2009 y en la actualidad extendiendonos hacia el interior del país (Regional Norte, CURE) y el extranjero mediante del desarrollo de la modalidad semipresencial. Durante el 2008-2009, realicé una estadía sabática en la Universidad Católica del Norte, Antofagasta-Chile, convocada por el Programa de Mejoramiento de la Calidad y Equidad de la Educación Superior (MECESUP) para promover el desarrollo de la enseñanza, investigación e innovación en Química Farmacéutica, Química-Física y Bioinformática. Esta experiencia, altamente gratificante y formativa, me ha interiorizado del sistema de investigación e innovación chileno y con los sectores empresariales, académicos, agencias e instituciones de innovación. Siento una gran vocación por la Integración Participativa promoviendo actividades de extensión hacia el medio (Sector Productivo vitivinícola y apícola uruguayo y chileno) y tendiendo puentes entre los diferentes niveles de enseñanza, promoviendo actividades presenciales con docentes y estudiantes del Liceo No 1 IPOLL de Salto y Escuela Guatemala-Montevideo.

Producción bibliográfica

Artículos publicados

Arbitrados

Completo

B VERA; K. VAZQUEZ; C. MASCAYANO; R. TAPIA; V. ESPINOSA; J SOTO-DELGADO; C.O. SALAS; M. PAULINO ZUNINI
Structural Analysis and Molecular Docking of Trypanocidal Aryloxy-quinones in Trypanothione and Glutathione Reductases: A Comparison with Biochemical Data. Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 35 8, p.: 1785 - 1803, 2017

Palabras clave: quinonas; tripanosomicidas; tripanotiona reductasa

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 07391102 ; DOI: 10.1080/07391102.2016.1195283



Completo

LÓPEZ C; ALZATE J; M. PAULINO ZUNINI; MELLA J; C.O. SALAS; R. TAPIA; J SOTO
Combined Molecular Modelling and 3D-QSAR Study for Understanding the Inhibition of NQO1 by Heterocyclic Quinone Derivatives. Chemical Biology and Drug Design, 2017

Palabras clave: quinonas; cancer; NQO1

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Software

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 17470285

Completo

K. VAZQUEZ; M. PAULINO ZUNINI; C.O. SALAS; ZáRATE JJ; B VERA; RIVERA G
Trypanothione Reductase: A Target for the Development of Anti-Trypanosoma cruzi drugs. Mini Reviews in Medicinal Chemistry, v.: 17, 2017

Palabras clave: chagas; quinonas

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 13895575 ; DOI: 10.2174/1389557517666170315145410



Completo

D CARVALHO; M. PAULINO ZUNINI; POLTICELLI F; WILLIAMS R; ABIN JA

Structural evidence of quercetin multi-target bioactivity: a reverse virtual screening strategy. European Journal of Pharmaceutical Sciences, 2017

Palabras clave: quercetina; Anclaje reverso; nuevas dianas

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Software

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 09280987



SCOPUS

Completo

M C SALAVERRY; A COSTÁBILE; S ECHAVERRIA; ESTELA CASTILLO; M. PAULINO ZUNINI; A. ESTÉVES

Identification of novel CAP superfamily protein members of Echinococcus granulosus protoscoleces. Acta Tropica, 2016

Palabras clave: Echinococcus granulosus

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 0001706X ; DOI: 10.1016/j.actatropica.2016.02.011



SCOPUS



Sistema Nacional de Investigadores

Completo

ALVAREDA E; DENIS P; IRIBARNE F; M. PAULINO ZUNINI

Bond dissociation energies and enthalpies of formation of flavonoids: a G4 and M06-2X investigation. Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1091, p.: 18 - 23, 2016

Palabras clave: Bond dissociation; flavonoids; G4; M06-2X

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 2210271X ; DOI: 10.1016/j.comptc.2016.06.021



SCOPUS



Completo

GONZÁLEZ Y; EZZATTI O; PAULINO ZUNINI M.

Unleashing the graphic processing units-based version of NAMD. Bioinformatics and Biology Insights, v.: 9656, p.: 639 - 650, 2016

Palabras clave: NAMD; GPU; APOA1

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Software

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 11779322 ; DOI: 10.1007/978-3-319-31744-1 56

SCOPUS



Completo

CH ESPINOSA-BUSTOS; J CALDERÓN; A CAÑETE; RA TAPIA; M FAUNDEZ; MJ TORRES; A AGUIRRE; M. PAULINO ZUNINI; CO SALAS

Synthesis and pharmacophore modelling of 2,6,9-trisubstituted purine derivatives and their potential role as apoptosis-inducing agents in cancer cell lines. Molecules, v.: 20 4, p.: 6808 - 6826, 2015

Palabras clave: purine; apoptosis; pharmacophore

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 14203049 ; DOI: 10.3390/molecules20046808

http://www.mdpi.com/journal/molecules/sections/medicinal_chemistry



SCOPUS



Completo

R. CARRARO; F. IRIBARNE; M. PAULINO ZUNINI

Analysis of Cyclosporin A and a Set of Analogues as Inhibitors of a T. cruzi Cyclophilin by Docking and Molecular Dynamics. Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 2015

Palabras clave: cyclophilin ; chagas; linear interaction energy (LIE); molecular dynamics

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel ; *Lugar de publicación:* Guilderland, NY, USA ; *ISSN:* 07391102 ; *DOI:* 10.1080/07391102.2015.1038584

<http://dx.doi.org/10.1080/07391102.2015.1038584>



SCOPUS



Completo

K. VAZQUEZ; CH ESPINOSA-BUSTOS; J SOTO-DELGADO; RA TAPIA; J. VARELA; E BIRRIEL; RODRIGO SEGURA; JAIME PIZARRO; H. CERECETTO; M GONZALEZ; M. PAULINO ZUNINI; CO SALAS

New aryloxy-quinone derivatives as potential Anti-Chagasic agents: Synthesis, trypanosomicidal activity, electrochemical properties, pharmacophore elucidation and 3D-QSAR analysis. RSC Advances, 2015

Palabras clave: quinones; chagas

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Medicina Química

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

Medicina Química

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 20462069



SCOPUS

Completo

M. PAULINO ZUNINI; E. ALVAREDA; F. IRIBARNE; P. MIRANDA ; V. ESPINOSA; S. AGUILERA-MORALES; H. PARDO

Towards the understanding of the molecular basis for the inhibition of COX-1 and COX-2 by phenolic compounds present in Uruguayan propolis and grape pomace . Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 2015

Palabras clave: ciclooxigenase; antiinflammatory effect; phenols; flavonoids; propolis; grape pomace

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de compuestos bioactivos

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 07391102 ; *DOI:* 10.1080/07391102.2015.1124808

<http://www.jbsdonline.com/jbsd-taken-over-taylor-and-francis-c4319.html>



SCOPUS



Completo

M VEGA TEIJIDO; M. PAULINO ZUNINI; C. LOPEZ; M.J. RODRIGO

A theoretical study of CCD4a dioxygenase of citrus, a cleavage enzyme of carotenoids in plants. Revista Processos Químicos, v.: 9 18, p.: 163 - 163, 2015

Palabras clave: carotenoids; dioxygenase; citrus

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel ; *Lugar de publicación:* Goiania - Brazil ; *ISSN:* 19818521

Completo

E. ALVAREDA; P. MIRANDA ; V. ESPINOSA; H. PARDO; S. AGUILERA-MORALES; M. PAULINO ZUNINI

Antiinflammatory activity of phenolic compounds extracted from Uruguayan propolis and grape. Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 33 1, p.: 129 - 129, 2015

Palabras clave: phenols; flavonoids; antiinflammatory; grape pomace; propolis

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

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 07391102 ; *DOI:* 10.1080/07391102.2015.1032833

<http://dx.doi.org/10.1080/07391102.2015.1032833>



SCOPUS



Completo

M. PAULINO ZUNINI

PROVITIS: Un consorcio entre la Ciencia y la Producción. VOCES, v.: 464, 2015

Palabras clave: propolis; orujos de uvas

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de compuestos bioactivos

Medio de divulgación: Papel ; *Lugar de publicación:* Montevideo ; *ISSN:* 11303336



Completo

R. TAPIA; C.O. SALAS; K. VAZQUEZ; CH ESPINOSA-BUSTOS; J SOTO-DELGADO; J. VARELA; E BIRRIEL; H. CERECETTO; M GONZALEZ; M. PAULINO ZUNINI

Synthesis and biological characterization of new aryloxyindole-4,9-diones as potent trypanosomicidal agents. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, v.: 24 16, p.: 3919 - 3922, 2014

Palabras clave: indolquinonas; chagas; farmacóforo

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 0960894X

Ms. Ref. No.: BMCL-D-14-00714R1 Title: Synthesis and biological characterization of new aryloxyindole-4,9-diones as potent trypanosomicidal agents *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* Dear Dr Tapia, I am pleased to notify you that your manuscript 'Synthesis and biological characterization of new aryloxyindole-4,9-diones as potent trypanosomicidal agents' has been accepted for publication in *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. When your paper is published on ScienceDirect, you want to make sure it gets the attention it deserves. To help you get your message across, Elsevier has developed a new, free service called AudioSlides: brief, webcast-style presentations that are shown (publicly available) next to your published article. This format gives you the opportunity to explain your research in your own words and attract interest. You will receive an invitation email to create an AudioSlides presentation shortly. For more information and examples, please visit <http://www.elsevier.com/audioslides>. Thank you for submitting your work to *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. With kind regards, Dale L. Boger, Ph.D. Editor-in-Chief *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*



Completo

A. MELÉNDEZ-MARTÍNEZ; M. PAULINO ZUNINI; C STINCO; P MAPELLI-BRAHM; X-D. WANG

STUDY OF THE TIME-COURSE CIS/TRANS (Z/E) ISOMERISATION OF LYCOPENE, PHYTOENE AND PHYTOFLUENE FROM TOMATO. TECHNOLOGICAL AND NUTRITIONAL IMPLICATIONS. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2014

Palabras clave: carotenoides, bioinformatica

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 00218561



Completo

G. ALVITE; N GARRIDO; A KUN; M. PAULINO ZUNINI; A. ESTÉVES

Towards an Understanding of Mesocestoides vogae Fatty Acid Binding Proteins' Roles. *PLoS ONE*, v.: 9 10, p.: 1 - 11, 2014

Palabras clave: FABPs; Mesocestoides Vogae

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica de parásitos

Medio de divulgación: Papel ; *Lugar de publicación:* Canada ; *ISSN:* 19326203



Completo

A. ESTÉVES; M. PAULINO ZUNINI

In silico studies of Echinococcus granulosus FABPs. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, v.: 31 2, p.: 224 - 239, 2013

Palabras clave: E granulosus, FABPs, bioinformatica estructural

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 07391102 ; *DOI:* 10.1080/07391102.2012.698246

Completo

P. ESPERÓN; C. SCAZZOCCHIO ; M. PAULINO ZUNINI

In vitro and in silico analysis of the Aspergillus nidulans DNA-CreA repressor interactions. Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 2013

Palabras clave: Zinc finger; DNA-protein interaction; TGEK Linker; Aspergillus nidulans

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, análisis conformacional

Medio de divulgación: Papel ; *Lugar de publicación:* UK ; *ISSN:* 07391102 ; *DOI:* [Epub ahead of print] PMID: 24125468 [PubMed - a

http://www.tandfonline.com/toc/tbsd20/current#_Ui4zvsYreul

08-Sep-2013 Dear Dr Paulino: Ref: In vitro and in silico analysis of the Aspergillus nidulans DNA-CreA repressor interactions We are pleased to accept your paper in its current form which will now be forwarded to the publisher for copy editing and typesetting. You will receive proofs for checking, and instructions for transfer of copyright in due course. The publisher also requests that proofs are checked through the publisher's tracking system and returned within 48 hours of receipt. Thank you for your contribution to Journal of Biomolecular Structure & Dynamics and we look forward to receiving further submissions from you. Sincerely, Professor Sarma Editor in Chief, Journal of Biomolecular Structure & Dynamics rhs07@albany.edu

Sistema Nacional de Investigadores

Completo

J. TAKS; M. PAULINO ZUNINI

Flavonoides en Productos Naturales - Entrevista a Margot Paulino Zunini realizada por Javier Taks. Trama. Revista de Cultura y Patrimonio, v.: 3, p.: 86 - 99, 2011

Palabras clave: antioxidantes; marcela

Areas del conocimiento: Ciencias Sociales / Sociología / Antropología, Etnología / Antropología Social

Medio de divulgación: Papel ; *Lugar de publicación:* Montevideo ; *ISSN:* 16886348



Completo

M. PAULINO ZUNINI; C. ROJAS; S. DEPAULA; I. ELINGOLD; E. ALVAREDDA; M.B. CASANOVA; F. IRIBARNE; S. AGUILERA-MORALES; M. DUBIN

Phenolic contents and antioxidant activity in central southern Uruguayan propolis extracts.. Journal of the Chilean Chemical Society, v.: 55 1, p.: 141 - 146, 2010

Palabras clave: antioxidantes; propolis

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antichagásicas

Medio de divulgación: Papel ; *Lugar de publicación:* Chile ; *ISSN:* 07179707

Completo

A. ABIN-CARRIQUIRY; M. PAULINO ZUNINI; B. K. CASSELS; S. WONNACOTT; F. DAJAS

In silico characterization of cytisinoids docked into an Acetylcholine Binding Protein. . Bioorganic & Medicinal Chemistry, v.: 20, p.: 3683 - 3687, 2010

Palabras clave: nicotínicos; in silico

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel ; *Lugar de publicación:* Amsterdam ; *ISSN:* 09680896

Completo

F. IRIBARNE; M. PAULINO ZUNINI; S. AGUILERA-MORALES; O. TAPIA

Assaying phenothiazine derivatives as trypanothione reductase and glutathione reductase inhibitors by theoretical docking and Molecular Dynamics studies. Journal of molecular graphics & modelling, v.: 28, p.: 371 - 381, 2009

Palabras clave: Chaga's disease; Phenothiazines; trypanothione reductase; binding affinity; theoretical docking; molecular dynamics

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 10933263 ; DOI: 10.1016/j.jmgm.2009.09.003

www.elsevier.com/locate/JMGM



SCOPUS



Completo

M. PAULINO ZUNINI; E.M. ALVAREDA; P. A. DENIS; E. J. BARREIRO; G.M. SPERANDIO DA SILVA; M. DUBIN ; C. GASTELLÚ; S. AGUILERA ; O. TAPIA

Studies of Tripanocidal (Inhibitory) Power of Naphthoquinones: Evaluation of Quantum Chemical Molecular Descriptors for Structure-activity Relationships. European Journal of Medical Chemistry, v.: 43 10, p.: 2238 - 2246, 2008

Palabras clave: naphthoquinones; trypanocidas

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Internet ; ISSN: 02235234 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

F. IRIBARNE; H. CERECETTO; M. GONZÁLES; S. AGUILERA ; O. TAPIA; M. PAULINO ZUNINI

Interaction energies of nitrofurans with trypanothione reductase and glutathione reductase studied by molecular docking. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 818, p.: 7 - 22, 2007

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 01661280 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

R. CARRARO; J. BÚA; A. RUIZ; M. PAULINO ZUNINI

Modelling and study of cyclosporin A and related compounds complexes with a Trypanosoma cruzi cyclophilin. Journal of molecular graphics & modelling, v.: 26, p.: 48 - 61, 2007

Palabras clave: ciclofilina; Trypanosoma cruzi

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 10933263 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos

Es uno de los trabajos mas relevantes de mi producción



SCOPUS

Completo

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; M. DUBIN ; S. AGUILERA-MORALES; O. TAPIA; A.O.M. STOPPANI

The chemotherapy of Chaga's disease: An overview. Mini Reviews in Medicinal Chemistry, v.: 5, p.: 173 - 183, 2005

Palabras clave: chagas; quimioterapia del chagas

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 13895575 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda

Es uno de los trabajos mas relevantes de mi producción.



SCOPUS

Completo

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; M. HANSZ; N. HIKICHI; M. VEGA; G. SEOANE ; H. CERECETTO; R. DI MAIO; I. CARACELLI; I. ZUKERMAN-SCHPECTOR; C. OLEA-AZAR; P. MIRANDA ; M. BERRIMAN; A.H. FAIRLAMB ; O. TAPIA
Computer assisted design of potentially active anti-trypanosomal compounds. . Journal of Molecular Structure, v.: 584, p.: 95 - 105, 2002

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00222860 ; Idioma/Pais: Inglés/Uruguay



SCOPUS

Completo

M. PAULINO ZUNINI; M. VEGA; P. ESPERÓN; C. SCAZZOCCHIO ; O. TAPIA

Modelling CreA protein-DNA recognition determinants. A molecular dynamics study of fully charged CreA-DNA model in water. . Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 584, p.: 225 - 242, 2002

Palabras clave: Aspergillus nidulans; CreA

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 01661280 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos

Es uno de los trabajos mas relevantes de mi producción



SCOPUS

Completo

F. IRIBARNE; M. PAULINO ZUNINI; S. AGUILERA ; M. MURPHY ; O. TAPIA

Docking and molecular dynamics studies at trypanothione reductase and glutathione reductase binding sites. Journal of Molecular Modeling, v.: 5, p.: 173 - 183, 2002

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 09485023 ; Idioma/Pais: Inglés/Uruguay

SCOPUS

Completo

G. A. ARTECA; M. PAULINO ZUNINI; C.T. REINMANN; O. TAPIA

Relaxation dynamics of biopolymers seeded with unfolded lysozyme transients in vacuo. The role of primary sequence in protein folding. Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 2, p.: 5259 - 5267, 2001

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 14639076 ; Idioma/Pais: Inglés/Suiza



SCOPUS

Completo

F. IRIBARNE; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

Hydride Transfer Transition Structure as an Unifying Redox Step for Describing the Branched Kinetics of Glutathione Reductase. Molecular-Electronic Antecedents. . Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 103, p.: 451 - 462, 2000

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

ISSN: 1432881X ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

G. ROXSTROM; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

Recognition determinants in T4«G4 mutant derived from a (5« GCGTGGGCGT-«4) oligomer in a Zif268-DNA complex. A molecular dynamics study of the fully charged complex in water. . Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 104, p.: 96 - 108, 2000

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

ISSN: 1432881X ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

A.O.M. STOPPANI ; S. GOIJMAN; M. DUBIN ; S.H. FERNÁNDEZ-VILLAMIL ; M.P. MOLINA PORTELA; A.M. BISCARDI; M. PAULINO ZUNINI

Cytotoxicity of lipophilic o-naphthoquinones: structure-activity relationships. Comparative biochemistry and physiology. Toxicology & pharmacology, v.: 7, p.: 1 - 16, 2000

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

ISSN: 15320456 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

Completo

V. PSZENNY ; S.O. ANGEL ; M. PAULINO ZUNINI; B. LEDESMA; E. GUARNERA ; A.M. RUIZ; E. BONTEMPI

Molecular cloning, sequencing and expression of a serine proteinase inhibitor gene from Toxoplasma gondii. . Molecular and Biochemical Parasitology, v.: 107, p.: 241 - 249, 2000

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

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 01666851 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

H. CERECETTO; R. DI MAIO; M. GONZALEZ ; M. RISSO; G. SAGRERA ; G. SEOANE ; A. DENICOLA ; G. PELUFFO; C. QUIJANO; A. O. M. STOPPANI; M. PAULINO ZUNINI; C. OLEA-AZAR; M. A. BASOMBRÍO

Synthesis and anti-trypanosomal evaluation of E-isomers of 5-nitro-2 furaldehyde and 5-nitrothiophene-2- carboxaldehyde semicarbazone derivatives. Structure-activity relationships. . European Journal of Medical Chemistry, v.: 35, p.: 343 - 350, 2000

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

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 02235234 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

M. PAULINO ZUNINI; A. ESTEVES; M. VEGA; G. TABARES ; R. EHRLICH; O. TAPIA

Modelling a 3D Structure for EgDf1 from Echinococcus granulosus. Putative epitopes, phosphorylation motifs and ligand. . Journal of Computer-Aided Molecular Design, v.: 12, p.: 351 - 360, 1998

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

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 0920654X ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Es uno de los trabajos mas relevantes de mi producción



SCOPUS

Completo

G. ROXTROM; I. VELÁZQUEZ; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

Molecular Dynamics Simulation of a Zif268-DNA Complex in Water. Spatial Patterns and Fluctuations Sensed from a Nanosecond Trajectory. G. Journal of Chemical Physics, v.: 102, p.: 1828 - 1832, 1998

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

ISSN: 00219606 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Gran Bretaña

Completo

G. ROXSTROM; I. VELÁZQUEZ; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

DNA Structure and Fluctuations Sensed from a 1.1ns Molecular Dynamics TRajjectory of a Fully Charged Zif268-DNA Complex in Water. G. Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 2, p.: 301 - 302, 1998

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

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 07391102 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

H. CERECETTO; R. DI MAIO; G IBARRURI; G. SEOANE ; A. DENICOLA; C. QUIJANO; C PELUFFO; M. PAULINO ZUNINI

Synthesis and Anti-Trypanosomal Activity of Novel 5-Nitro-2-furaldehyde and 5-Nitrothiophene-2-carboxaldehyde Semicarbazones Derivatives. Farmaco, v.: 53, p.: 84 - 94, 1998

Palabras clave: anti tripanosoma; chagas; semicarbazonas

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

Medio de divulgación: Papel ; *Lugar de publicación:* Francia ; *ISSN:* 0014827X

Completo

A. ESTEVES; M. PAULINO ZUNINI; L. JOSEPH; R. EHRLICH

Remarks no the Phylogeny and Structure of Fatty Acid Binding Proteins from Parasitic Platyhelminths. International Journal for Parasitology, v.: 27, p.: 1013 - 1023, 1997

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

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 00207519 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda

Completo

W. DIAZ; J.M. AULLO; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

Transition structure and reactive complexes for hydride transfer in an isoalloxazine-nicotinamide complex. On the catalytic mechanism of a glutathione reductase. An ab initio MO SCF study. . Journal of Chemical Physics, v.: 204, p.: 195 - 203, 1996

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

ISSN: 00219606 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

I. CARACELLI; F.M.L.G. STAMATO; B. MESTER; M. PAULINO ZUNINI; H. CERECETTO

A new analogue of Nifurtimox. Acta Crystallographica Section C-Crystal Structure Communications, v.: 52, p.: 1281 - 1282, 1996

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

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 01082701 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

A.O.M. STOPPANI ; M. PAULINO ZUNINI; M. DUBIN

Oxygen radicals and the chemotherapy of Chagas`s disease: an overview. *Ciência e Cultura*, v.: 48 1 2, p.: 75 - 86, 1996

Palabras clave: free radicals; chaga´s disease

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00096725

http://cienciaecultura.bvs.br/scielo.php?script=sci_serial&lng=en&pid=0009-6725&nrm=iso



Completo

M. PAULINO ZUNINI; F.M.L.G. STAMATO; R. GARRAT; C.M. SOARES

Computer assisted simulations and molecular graphics methods in molecular design. 2. Proteinases and Receptor and Transport Proteins. . *Molecular Engineering*, v.: 4, p.: 375 - 414, 1995

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 09255125 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

N. HIKICHI; M. PAULINO ZUNINI; M. HANSZ; O. TAPIA

A Molecular Dynamic Study of Structure of glutathione reductase.. *Journal of Molecular Structure*, v.: 335, p.: 243 - 254, 1995

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00222860 ; *Idioma/Pais:* Español/Estados Unidos



Completo

O. TAPIA; M. PAULINO ZUNINI; F.M.L.G. STAMATO

Computer assisted simulations and molecular graphics methods in molecular design. Theory and applications to enzyme active-site-directed drug design. . *Molecular Engineering*, v.: 3, p.: 377 - 414, 1994

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 09255125 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

M. PAULINO ZUNINI; M. HANSZ; N. HIKICHI; A.O.M. STOPPANI

Electronic Properties and Free Radical Production by Nitrofurans Compounds. . *Free Radical Research*, v.: 16, p.: 207, 1992

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 10715762 ; *Idioma/Pais:* Español/Estados Unidos

Completo

E. HORJALES; B. OLIVA ; F.M.L.G. STAMATO; M. PAULINO ZUNINI; O. NILSSON

A computer Model Built Structure of the T. Congolense Trypanothione Reductase in Complex with NADP. *Molecular Engineering*, v.: 1, p.: 357 - 375, 1992

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 09255125 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

M. PAULINO ZUNINI; F. STAMATO; A.O.M STOPPANI; O. TAPIA

Novel approach to the study of the mode of action of new antichagasic chemicals. *Memórias do Instituto Oswaldo Cruz*, v.: 87, p.: 76, 1992

Palabras clave: antichagasic; mode of action

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Enfermedad de Chagas, Química Médica

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00740276



Completo

M. PAULINO ZUNINI; M. HANSZ; N. HIKICHI; G. TABARES; MP MOLINA PORTELA; S.H. FERNANDEZ-VILLAMIL; C SREIDER; AOM STOPPANI

Propiedades Electrónicas y actividad redox de naftoquinonas. Anales de la Sociedad Científica Argentina, v.: 82 5, p.: 379 - 389, 1992

Palabras clave: naftoquinonas

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

Medio de divulgación: Papel ; *Lugar de publicación:* Buenos Aires Argentina ; *ISSN:* 00378437



Completo

M. DUBIN ; S. FERNÁNDEZ ; M. PAULINO ZUNINI; A.O.M. STOPPANI

Inhibition of Microsomal Lipid Peroxidation and Cytocrome P-450 Catalyzed Reactions by Nitrofurán Compounds. Free Radical Research, v.: 14, p.: 419 - 431, 1991

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

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 10715762 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

E. CIVILA; R. SALVATELLA; R. MANCEBO; R. ROSA; Y. BASMADJIAN; G. MENDARO; M. FERNÁNDEZ; G. SARROCA; M. PAULINO ZUNINI; S. CASSERONE; G. PÉREZ BORMIDA

Acción del ketoconazol sobre un modelo experimental agudo de infección por Trypanosoma cruzi. . Revista Uruguaya de Patología Clínica, v.: 22, p.: 405, 1990

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

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 00350559 ; *Idioma/Pais:* Español/Uruguay

Completo

E.L. COITIÑO; K. IRVING; J. RAMA; A. IGLESIAS; M. PAULINO ZUNINI; O.N. VENTURA

Theoretical studies of Hydrogen-bonded complexes : using semiempirical methods. . Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 69, p.: 405 - 415, 1990

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

Medio de divulgación: Papel ; *Lugar de publicación:* Facultad de Química - UdelaR ; *ISSN:* 01661280 ; *Idioma/Pais:* Español/Uruguay



SCOPUS

Completo

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI; M. HANSZ; O.N. VENTURA

Molecular Modelling of Glutathione : A Comparison with Crystallographic Data. . Journal of Molecular Structure, v.: 210, p.: 467, 1990

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

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 00222860 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Bélgica



SCOPUS

Sistema Nacional de Investigadores

Completo

B. MESTER; N. HIKICHI; M. HANSZ; M. PAULINO ZUNINI

Quantitative Structure Activity Relationships of 5-Nitrofurán Derivatives. Chromatographia, v.: 30, p.: 191, 1990

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

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 00095893 ; *Idioma/Pais:* Español/Suecia



SCOPUS

Completo

M. PAULINO ZUNINI; R.M. SOSA

Estudio mecánico-cuántico de las conformaciones y espectros electrónicos de algunos ácidos hidroxámicos y sus iones. . Anales de La Facultad de Química de Montevideo, v.: 9, p.: 28, 1979

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

Medio de divulgación: Papel ; *ISSN:* 07971400 ; *Idioma/Pais:* Español/Uruguay

No Arbitrados

Completo

M. PAULINO ZUNINI

Una nueva estrategia en la lucha contra la Enfermedad de Chagas : modelado molecular adaptado al diseño de quimioterápicos de baja toxicidad. M.Paulino de Blumenfeld. Intercambio. 1 (1990) 4. Revista no Arbitrada. Intercâmbio, v.: 1, p.: 4, 1990

Palabras clave: Chagas, nuevos fármacos

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antichagásicas

Medio de divulgación: Papel ; *Lugar de publicación:* Montevideo ; *ISSN:* 0873366X

Artículos aceptados

Arbitrados

Sistema Nacional de Investigadores

Completo

P. MIRANDA ; M. PAULINO ZUNINI; A. GAMBARO; A. ROASCIO; ÁLVARO W. MOMBRÚ; ALEJANDRA RODRÍGUEZ-HARALAMBIDES; MAURICIO ARGIMÓN; PATRICIA ZIMET; IRIS MIRABALLES; H. PARDO

Preparation and Characterization of Tannat Grape Pomace Extract Liposomes. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2016

Palabras clave: tannat; fenoles; orujos; liposomas

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de compuestos bioactivos

ISSN: 00218561



Libros

Libro compilado , Revista

M. PAULINO ZUNINI; R. RADII; L. FLOHE

Reporte sobre la Enfermedad de Chagas del Grupo de Trabajo Científico. Programa Especial de Investigaciones y Enseñanzas sobre Enfermedades Tropicales (TDR) /SWG/09 . 2007. *Número de volúmenes:* 1, *Nro. de páginas:* 83,

Editorial: Organización Mundial de la Salud , Ginebra

Palabras clave: Enfermedad de Chagas

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Enfermedad de Chagas

Medio de divulgación: Papel;

Financiación/Cooperación: Institución del exterior / World Health Organization, Panamerican Health Organization / Cooperación

www.who.int/tdr

Capítulos de Libro

Capítulo de libro publicado

M. PAULINO ZUNINI

Creación y Evolución de dos posgrados Interdisciplinarios PEDECIBA-UdelaR: Maestría y Diploma de Especialización en Bioinformática , 2015

Libro: En-clave Inter: Educación superior e Interdisciplina. v.: 6, p.: 51 - 58,

Organizadores: Espacio Interdisciplinario de la Universidad de la República

Editorial: Espacio Interdisciplinario de la Universidad de la República , Montevideo

Palabras clave: Bioinformática

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática

Medio de divulgación: Papel; *ISSN/ISBN:* 9789974012912; *En prensa:* Si

Comisión Académica de Posgrado / Apoyo financiero; Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas /

Apoyo financiero

http://www.ei.udelar.edu.uy/renderPage/index/pageld/976#heading_5866

Capítulo de libro publicado

M. PAULINO ZUNINI

Theoretical and Experimental Pharmacological Approach to Chagas Disease: specific action of new drugs against flavoenzymes of the parasitic related organisms and the mammalian host , 1997

Libro: Molecular Biochemical and Immunological Approaches to Parasitic Diseases. . v.: 1, p.: 90 - 95,

Organizadores: Swedish Agency for Research Cooperation with Developing Countries (SAREC). Ricardo Ehrlich. Facultad de Ciencias, UdelaR, Montevideo, Uruguay

Editorial: Edilce , Montevideo

Palabras clave: chagas; antichagasic

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

Medio de divulgación: Papel;

Financiación/Cooperación: Swedish International Development Agency / Cooperación

Capítulo de libro publicado

M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

Computer simulations and molecular graphics modeling. The 3-D structure of transport proteins. , 1994

Libro: Biology of Parasitism. p.: 249 - 263, Uruguay

Organizadores: R. Ehrlich and A. Nieto

Editorial: Editorial Trilce , Montevideo

Palabras clave: Computer simulations, molecular graphics

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular, Enfermedad de chagas

Medio de divulgación: Papel; *Idioma/Pais:* Español/Uruguay;

Financiación/Cooperación: Institución del exterior / Cooperación

Capítulo de libro publicado

M. PAULINO ZUNINI; F.M.L.G. STAMATO; E. HORJALES; N. HIKICHI; M. HANSZ; B. OLIVA ; O. NILSSON ; O. TAPIA

Molecular Modelling as a tool to help design selective antichagasic drugs , 1992

Libro: The Chemistry of the XXI Century. Molecular Modelling.. p.: 131 - 152, Uruguay

Organizadores: Marco A.C. Nascimento

Editorial: Editorial World Scientific. , NY

Palabras clave: Molecular Modelling, antichagasic

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular, Enfermedad de chagas

Medio de divulgación: Papel; *Idioma/Pais:* Español/Uruguay;

Financiación/Cooperación: Institución del exterior / SAREC / Cooperación

Documentos de Trabajo

Completo

M. PAULINO ZUNINI

Palabras clave: Bioinformática

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Completo

M. PAULINO ZUNINI

Informes finale de la fase de organización y fase I proyecto ChagaSpace. Agosto 2003, EARTH, Costa Rica y University of Alabama - Birmingham, CBSE, Agosto 2003. , 2003

Serie: 1 , 1 , Costa Rica

Palabras clave: ChagaSpace

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antichagásicas

Medio de divulgación: CD-Rom

Completo

M. PAULINO ZUNINI

Informe de avances de la fase de organización y fase I proyecto ChagaSpace. Agosto 2002, EARTH, Costa Rica y University of Alabama - Birmingham, CBSE , 2002

Serie: 1 , 1 , Costa Rica

Palabras clave: ChagaSpace

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antichagásicas

Medio de divulgación: CD-Rom

Trabajos en eventos

Completo

Y GONZÁLES; P EZZATTI; M. PAULINO ZUNINI

Unleashing the Graphic Processing Units-based version of NAMD , 2015

Evento: Internacional , The 13th IEEE International Symposium on Parallel and Distributed Processing with Applications (IEEE ISPA-15) Helsinki, Finland, 20-22 August, 2015 , HELISNSKI , 2015

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: NAMD; ACCELERATED MOLECULAR DYNAMICS

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Enseñanza de postgrado en Bioinformática

Completo

M. PAULINO ZUNINI; M. VEGA; C. LOPEZ; M.J. RODRIGO

An In Silico Study of the Dioxygenases CCD4 family Substrates in Citrus , 2015

Evento: Internacional , Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Torino - Italia , 2015

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: carotenoids

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

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

www.chitel2015.org

Resumen

VEGA-TEIJIDO M; M. PAULINO ZUNINI; LOPEZ C; RODRIGO MJ

Modeling studies of CCD4a of citrus, a cleavage enzyme of carotenoids in plants , 2015

Evento: Internacional , Fitoquímicos en Agroalimentación Salud , Montevideo , 2015

Palabras clave: carotenoides; CCD4a ; Molecular modelling; molecular dynamics

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

CYTED / Apoyo financiero; Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

Resumen

ALVAREDA E; IRIBARNE F; ESPINOSA V; MIRANDA P; PARDO H; AGUILERA S; M. PAULINO ZUNINI

ACTIVIDAD ANTI-INFLAMATORIA DE COMPUESTOS FENÓLICOS EXTRAÍDOS DE PROPÓLEOS Y ORUJOS DE UVA URUGUAYOS: ENSAYOS IN VITRO E IN SILICO , 2015

Evento: Internacional , Fitoquímicos en Agroalimentación Salud , Montevideo , 2015

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: fenoles; ciclooxigenasa COX-2 COX-1

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Medio de divulgación: Papel;

Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero; CYTED / Apoyo financiero

Resumen

CARVALHO D; ABIN-CARRIQUIRY A; ARREDONDO F; POLITICELLI F; M. PAULINO ZUNINI

Identificación de blancos de acción molecular de quercetina mediante tamizaje reverso , 2015

Evento: Internacional , Fitoquímicos en Agroalimentación Salud , Montevideo , 2015

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: quercetina; tamizaje reverso

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Medio de divulgación: Papel;

Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero; CYTED / Apoyo financiero

Resumen

B VERA; K. VAZQUEZ; M. PAULINO ZUNINI; C.O. SALAS

Análisis estructural y acoplamiento molecular de ariloxiquinonas tripanosomicidas en tripanotión y glutatión reductasa: una comparación con datos bioquímicos , 2015

Evento: Internacional , Mexico D.F. , 2015

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: quinonas; chagas

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

B VERA; K. VAZQUEZ; M. PAULINO ZUNINI; C.O. SALAS

Acoplamiento molecular de quinonas tripanosomicidas en tripanotión y glutatión reductasa , 2015

Evento: Internacional , 1er CONGRESO INTERNACIONAL DE VECTORES Y DEL Trypanosoma cruzi: PANORAMA ACTUAL Y EXPECTATIVAS , Guanajato Mexico , 2015

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: quinonas; acoplamiento; tripanotión reductasa; Glutathion Reductasa

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

B VERA; K. VAZQUEZ; C.O. SALAS; M. PAULINO ZUNINI

Análisis estructural y acoplamiento molecular de ariloxiquinonas tripanosomicidas en tripanotión y glutatión reductasa , 2015

Evento: Internacional , Simposium en Química Medicinal y Farmacéutica , C.F. México , 2015

Palabras clave: quinonas; tripanocidas; tripanotión reductasa; Glutathion Reductasa

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen expandido

VEGA-TEIJIDO M; M. PAULINO ZUNINI; LOPEZ C; RODRIGO MJ

A theoretical study of CCD4a dioxygenase of citrus, a cleavage enzyme of carotenoids in plants. , 2015

Evento: Internacional , XVIII Simposio Brasileiro de Química Teórica - SBQT 2015 , Pirenópolis - GO Brasil

Palabras clave: carotenoides; CCD4a ; Molecular modelling; molecular dynamics

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Medio de divulgación: Papel;

Financiación/Cooperación: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero

Resumen

B VERA; V VILLAMIL; K. VAZQUEZ; J SOTO; C.O. SALAS; M. PAULINO ZUNINI

Análisis estructural y anclaje molecular de quinonas tripanosomicidas en tripanotion reductasa y glutation reductasa , 2014

Evento: Nacional , Encuentro de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 2014

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: Anclaje reverso; tripanotiona reductasa; o-quinona; Glutation Reductasa; tripanosoma cruzi

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel;

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

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; R. CARRARO; F. IRIBARNE

Assaying Cyclosporin A and a set of analogues as inhibitors of a T. cruzi cyclophilin by docking and Molecular Dynamics , 2014

Evento: Internacional , 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists , Santiago de Chile , 2014

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: cyclophilin ; cyclosporin; Trypanosoma cruzi

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Otros;

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

watoc2014.com

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; D CARVALHO; ABIN A; F ARREDONDO

Quercetin Target Identification by Reverse Virtual Screening , 2014

Evento: Internacional , 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists , Santiago de Chile , 2014

Palabras clave: quercetin; reverse virtual screening

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Otros;

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

watoc2014.com

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; P. ESPERÓN; C. SCAZZOCCHIO

Aspergillus nidulans DNA-CreA pattern recognition: in vitro and in silico studies , 2014

Evento: Internacional , 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists , Santiago de Chile , 2014

Palabras clave: Aspergillus nidulans; CreA

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Otros;

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

watoc2014.com

Resumen

M. VEGA; C. LOPEZ; M.J. RODRIGO; M. PAULINO ZUNINI

Modeling, Docking and Molecular Dynamics studies of CCD4a with three carotenoids substrates. , 2014

Evento: Internacional , 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists , Santiago de Chile , 2014

Palabras clave: carotenoids; CCD4a

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Otros;

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

watoc2014.com

Resumen

R. TAPIA; C.O. SALAS; K. VAZQUEZ; J SOTO; M. PAULINO ZUNINI; J. VARELA; M GONZALEZ; H. CERECETTO

2-AryloxyNaphthoquinone derivatives as anti-Chagasic agentS: study of trypanocidal effect, selectivity, pharmacophoric map and 3D-QSAR , 2014

Evento: Internacional , EFMC-ISMIC 2014 - XXIII International Symposium on Medicinal Chemistry (EFMC-ISMIC 2014) , Lisboa - Portugal , 2014

Palabras clave: 2-AryloxyNaphthoquinone; Chagas disease

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

Medio de divulgación: Papel;

Financiación/Cooperación: Facultad de Química - UDeLaR / Cooperación

<http://www.allconferences.com/c/efmc-ismc-2014-xxiii-international-symposium-on-medicinal-chemistry-lisbon-2014-september-07>

Completo

K. VAZQUEZ; C.O. SALAS; M. PAULINO ZUNINI; R. TAPIA; C. ESPINOZA; J. VARELA; H. CERECETTO; M. GONZÁLES
SINTESIS, ESTUDIOS DE DOCKING Y EVALUACION DE LA ACTIVIDAD TRIPANOSOMICIDA DE NUEVAS QUINONAS
HETEROCICLICAS. , 2013

Evento: Internacional , XIX Simposio Nacional de Química Orgánica (XIX SINAQO) , La Plata Argentina , 2013

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Editorial: J. Varela, H. Cerecetto, M. González.

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Extracción, análisis e identificación de carotenoides

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

R. TAPIA; C.O. SALAS; K. VAZQUEZ; CH. ESPINOSA; J. VARELA; M. GONZÁLES; H. CERECETTO; M. PAULINO ZUNINI

Synthesis and docking studies of new aryloxy heterocyclic quinones as potential trypanosomicidal agents , 2013

Evento: Internacional , IUPAC World Chemistry Congress 2013 on 11-16 August 2013 in Istanbul, Turkey , Istanbul , 2013

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: quinonas; tripanotiona reductasa; Trypanosoma cruzi

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, Diseño de compuestos Bioactivos

Medio de divulgación: Internet;

<http://www.AbstractAgent.com/2013iupac>

Resumen

I. KREIMERMAN; E. SAVIO; P. OLIVER; M. PAULINO ZUNINI; H. ENGLER

Estudio in silico de moléculas marcadoras de astrocitos: potenciales agentes de diagnóstico PET para enfermedad de Alzheimer y otras encefalopatías , 2013

Evento: Nacional , ENAQUI Tercer Encuentro Nacional de Ciencias Químicas , Montevideo , 2013

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: PET; alzheimer; in silico

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

Medio de divulgación: CD-Rom;

Resumen

F. ZOPPOLO; E. SAVIO; P. OLIVER; M. PAULINO ZUNINI; H. ENGLER

Estudio in silico de ligandos de la GNMT: potenciales agentes de diagnóstico PET para el cáncer de próstata , 2013

Evento: Nacional , ENAQUI Tercer Encuentro Nacional de Ciencias Químicas , Montevideo , 2013

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: PET; cancer; in silico; GNMT Glycyl N metil transferasa

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

Medio de divulgación: CD-Rom;

Resumen

R. RODRIGUEZ; E. PAZOS; M. PAULINO ZUNINI; M. VEGA; A. MELÉNDEZ-MARTÍNEZ

Estudios in silico de la interacción de BCO1 con carotenoides de origen vegetal , 2013

Evento: Nacional , +Biofísica Segundo Encuentro de la Sociedad de Biofísica - SUB , Montevideo , 2013

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: BCMO1; carotenoides, bioinformatica

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

Medio de divulgación: Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. VEGA; C. LOPEZ; M.J. RODRIGO; M. PAULINO ZUNINI

Modelado por Homología, Anclaje y Dinámica Molecular de tres Dioxigenasas de Rotura de Carotenoides de Cítricos de la Subfamilia CCD4 , 2013

Evento: Nacional , +Biofísica Segundo Encuentro de la Sociedad de Biofísica - SUB , 2013

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: CCDs; carotenoides, bioinformatica; anclaje; dinámica molecular

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

E. ALVAREDA; P. MIRANDA ; V. ESPINOSA; H. PARDO; S. AGUILERA-MORALES; M. PAULINO ZUNINI

Antiinflammatory Activity of Phenolic Compounds extracted from Uruguayan Propolis and Grape (Vitis Vinifera) Pomace: In Vitro and In Silico Assays , 2013

Evento: Nacional , +Biofísica Segundo Encuentro de la Sociedad de Biofísica - SUB , 2013

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: COXII; antioxidantes, fenoles; docking

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

Resumen

P. ESPERÓN; C. SCAZZOCCHIO; M. PAULINO ZUNINI

Aspergillus nidulans DNA-CreA pattern recognition: in vitro and in silico studies , 2013

Evento: Nacional , +Biofísica Segundo Encuentro de la Sociedad de Biofísica - SUB , Montevideo , 2013

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: CreA; Aspergillus nidulans; docking; molecular dynamics; pattern recognition

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen expandido

A. MELÉNDEZ-MARTÍNEZ; M. PAULINO ZUNINI; C. STINCO ; X-D. WANG

STUDY OF THE TIME-COURSE CIS/TRANS ISOMERISATION OF LYCOPENE, PHYTOENE AND PHYTOFLUENE FROM TOMATO , 2013

Evento: Internacional , Pigments In Foods VII , Novara, Italia , 2013

Anales/Proceedings: "Pigments in Foods VII" Congress, held in Novara, Italy, on 18-21 June 2013Arbitrado: SI

Palabras clave: carotenoides

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, análisis conformacional

Medio de divulgación: CD-Rom;

Financiación/Cooperación: Institución del exterior / Red Iberoamericana de Carotenoides - CYTED / Cooperación

(<http://pif2013.org/>)

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; E. ALVAREDA; V. ESPINOSA; L. CALDERÓN

PREDICCIÓN DE TIEMPOS DE RETENCIÓN CROMATOGRÁFICOS DE FENOLES EN PROPÓLEOS UTILIZANDO MOE-QSAR y MOE-GA , 2012

Evento: Regional , XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 2012

Anales/Proceedings: Resúmenes de las XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , 60 , 60Arbitrado: SI

Editorial: ISSN: 1688-9819 XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias © SUB , Montevideo

Palabras clave: qsar, fenoles

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 16889819;

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

Resumen

A. BOADO; G. SILVA; J.A. ABIN; M. PAULINO ZUNINI

Nuevos agonistas de receptores nicotínicos de acetil colina obtenidos por QSAR y Filtrado Virtual con Farmacóforo , 2012

Evento: Regional , XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 2012

Anales/Proceedings: Resúmenes de las XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , 62 , 62Arbitrado: SI

Editorial: ISSN: 1688-9819 XIV Jornadas de la SUB © Sociedad Uruguaya de Biociencias , Montevideo

Palabras clave: nicotínicos, qsar, farmacóforo

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 16889819;

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

Resumen

M. PEARCE; A. ROASCIO; A. GAMBARO; H. PARDO; M. PAULINO ZUNINI

Desarrollo y caracterización de antioxidantes encapsulados a partir de orujo de uva. , 2012

Evento: Regional , XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 2012

Anales/Proceedings: Resúmenes de las XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , 122 , 122Arbitrado: SI

Editorial: ISSN: 1688-9819 XIV Jornadas de la SUB © Sociedad Uruguaya de Biociencias , Montevideo

Palabras clave: orujos, liposomas, antioxidantes

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / procesos extractivos, analisis de antioxidantes, liposomacion

Medio de divulgación: Papel;

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

Resumen

P. MIRANDA ; C. ZABALETA; E. BOIDO; H. PARDO; M. PAULINO ZUNINI

Estudio farmacofórico de fenoles de uvas y su anclaje a Xantina Oxidasa , 2012

Evento: Regional , XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 2012

Anales/Proceedings: Resúmenes de las XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , 43 , 43Arbitrado: SI

Editorial: ISSN: 1688-9819 XIV Jornadas de la SUB © Sociedad Uruguaya de Biociencias , Montevideo

Palabras clave: xantin oxidasa, fenoles, docking

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, docking

Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 16889819;

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

Resumen

A. ESTÉVES; M. PAULINO ZUNINI

In silico studies of Echinococcus granulosus FABPs - fatty acid interactions , 2011

Evento: Nacional , ENAQUI 2011 , Montevideo , 2011

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: Echinococcus granulosus; FABPs

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; M. PEARCE; A. ROASCIO; M. TAVOLARA; Y. RODRIGUEZ; V. ESPINOSA; S. AGUILERA-MORALES

Desarrollo y caracterización de antioxidantes encapsulados , 2011

Evento: Nacional , ENAQUI 2011 , Montevideo , 2011

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: antioxidantes, orujos de uva tannat, liposomado

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. DUBIN; M.E. DI ROSSO; M.L. BARREIRO ARCOS; I. ELINGOLD; M. PAULINO ZUNINI; E. DA SILVA; G. CREMASCHI

Estudio de citotoxicidad de naftofuranquinonas sobre el linfoma T murino EL-4 , 2010

Evento: Regional , Oncology Meeting , Buenos Aires , 2010

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: naftofuranquinonas; citotoxicidad

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica de los procesos cancerosos

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; J.A. ABIN; B.K. CASSELS; S. WONNACOTT; F. DAJAS

Estudio in silico de la interacción de citisinoides con la proteína de unión a acetilcolina , 2010

Evento: Nacional , Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias. Sección Biotecnología. , Maldonado , 2010

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: agonistas nicotínicos; docking

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel;

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

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; A. ESTÉVES

Modelado por homología y estudio comparativo por anclaje y dinámica molecular de la interacción entre ácidos grasos y las proteínas . EgFABP1 y EgFABP2 , 2010

Evento: Nacional , Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias. Sección Bioinformática , Maldonado , 2010

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: FABPs; docking; dinámica molecular

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel;

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

Resumen

G. ALVITE; A. KUHN ; M. PAULINO ZUNINI; A. ESTÉVES

FATTY ACID BINDING PROTEINS FROM CESTODES , 2010

Evento: Internacional , 51st International Conference on the Biosciences of Lipids , Bilbao España , 2010

Palabras clave: cestodes FABPs

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

L.A. CASTRO; S. AGUILERA-MORALES; F. IRIBARNE; M. PAULINO ZUNINI

In silico studies of sesquiterpene lactones with inhibitory activity of Nuclear Factor kappa B , 2010

Evento: Internacional , ISCB Latin-America , Montevideo , 2010

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: latonas sesquiterpénicas; factor nuclear kappa beta

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel;

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

Resumen

E. ALVAREDA; I. ELINGOLD; M. CASANOVA; C. ROJAS; M. DUBIN; M. PAULINO ZUNINI

Medidas de la capacidad antioxidante en extractos de propóleos uruguayos , 2007

Evento: Internacional , I Latin American Meeting on Medicinal Chemistry , Montevideo , 2007

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: antioxidantes; propoleos uruguayos

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

Medio de divulgación: Papel;

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero; Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; L. CALDERÓN; E. ALVAREDA; C. ROJAS; S. AGUILERA-MORALES

Estudios QSAR, Screening Virtual y "Docking" a Xantina Oxidasa de Polifenoles presentes en Productos Naturales , 2007

Evento: Internacional , I Latin American Meeting on Medicinal Chemistry , Montevideo , 2007

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: xantina oxidasa, fenoles, docking

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M.C. DONNAMARIA; M. PAULINO ZUNINI; S.N. MONACHESI; Z. CATALDI; F. LAGE

Modelización biomolecular de hormonas neuroendocrinas en soluciones acuosas y fisiológicas , 2006

Evento: Nacional , XXXV Annual Meeting of the Argentinean Biophysical Society , Santa fé, Rosario, Argentina , 2006

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: hormonas neuroendócrinas

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

E. ALVAREDA; M. CEDRÉS-FERNÁNDEZ; R. CARRARO; M. PAULINO ZUNINI

Estudios QSAR, PCA y de Screenig Virtual de polifenoles presentes en mieles, propóleos, marcela, té verde y carqueja , 2006

Evento: Internacional , V Reunión de la Sociedad Latinoamericana de Fitoquímica y I Congreso de Fitoterápicos del Mercosur , Montevideo , 2006

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: antioxidantes; propóleos

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel;

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

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; C. DONNAMARÍA; R. CARRARO; S.N. MONACHESI; Z. CATALDI; F. LAGE

Modeling of biopeptides in physiological solutions. molecular dynamics simulations , 2006

Evento: Internacional , Medynfol. XV Conference on Nonequilibrium Statistical Mechanics and Nonlinear Physics. , 2006

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: hormonas neuroendocrinas; dinámica molecular

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

Medio de divulgación: Papel;

Completo

F. IRIBARNE; S. AGUILERA-MORALES; M. PAULINO ZUNINI

Measuring Binding Affinities of Phenothiazines to Trypanothione Reductase And Glutathione Reductase By Theoretical Docking And Molecular Dynamics , 2005

Evento: Internacional , Annual International Meeting 2005 Membranes and Membrane Proteins , Dublin , 2005

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: Phenothiazines; trypanothione reductase; glutathione reductase

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel;

Financiación/Cooperación: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero; Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; E. ALVAREDA; P. A. DENIS; M. DUBIN; C. GASTELLU; S. AGUILERA-MORALES; A.O.M. STOPPANI

Structure-activity relationships of trypanocides , 2005

Evento: Internacional , Annual International Meeting 2005 Membranes and Membrane Proteins , Dublin , 2005

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Editorial: E.J. Barreiro, M. Dubin, C. Gastellu, S. Aguilera and A. O. M. Stoppiani

Palabras clave: trypanocides; QSAR

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel;

Financiación/Cooperación: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero; Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

Resumen

R. CARRARO; J. BÚA; A.RUIZ; M. PAULINO ZUNINI

Modelling and study of cyclosporin A and related compounds in complexes with T. cruzi and human cyclophilins , 2005

Evento: Internacional , MGMS Annual International Meeting 2005 Membranes and Membrane Proteins , 2005

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Editorial: . R. Carraro, J. Búa, A. Ruiz

Palabras clave: cyclosporin; cyclophilin ; Trypanosoma cruzi

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel;

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero; Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

Resumen

E. ALVAREDA; M. CEDRÉS-FERNÁNDEZ; L. SCHODERLE; C. MATONTE; L. CALDERÓN; M. PAULINO ZUNINI

Estudios QSAR de polifenoles presentes en mieles y propóleos , 2005

Evento: Regional , Primer Congreso de Apicultura del Mercosur , Maldonado , 2005

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: antioxidantes propoleos fenoles

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel;

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

Resumen

C. GUIDA; M. PAULINO ZUNINI; C. PAVETO; P.A. DENIS; L. CALDERÓN; S. AGUILERA-MORALES; H.TORRES; M.M. FLAWIÁ

Anti-Trypanosoma cruzi activity of green tea (Camellia sinensis) catechins. Structure Activity Relationship , 2004

Evento: Internacional , Advances in synthetic, Combinatorial and Medicinal Chemistry , Moscú , 2004

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: Camellia sinensis; Té verde; catequinas; Trypanosoma cruzi

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel;

Financiación/Cooperación: Institución del exterior / National Aeronautics and Space Administration / Apoyo financiero

Resumen

G.A. GARCÍA; P.A. GARAVAGLIA; M. PAULINO ZUNINI; T. MINNING; N. AINCIART; M. POTENZAA; A. M. RUIZ

Caracterización de una probable enzima del metabolismo de tioles del Trypanosoma cruzi , 2003

Evento: Internacional , . García, G.A.; Garavaglia, P.A.; Paulino, M.; Minning, T.; Ainciart, N.; Potenza, M.; Ruiz, A.M. Federacion Latinoamericana de Parasitología (FLAP), XVI Congreso Latinoamericano de Parasitología , La Paz , 2003

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Editorial: . García, G.A.; Garavaglia, P.A.; Paulino, M.; Minning, T.; Ainciart, N.; Potenza, M.; Ruiz, A.M

Palabras clave: tioles; Trypanosoma cruzi

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; L. LAFON; S. SEPÚLVEDA-BOZA; S. AGUILERA-MORALES; F. DAJAS

Relaciones Estructura-Actividad y estudio del Mecanismo de Acción de Flavonoides con propiedades reguladoras de la sobrevivencia y muerte celular , 2002

Evento: Internacional , XVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Montevideo , 2002

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: QSAR; flavonoides; muerte celular

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

A. GARCIA OTERO; F. IRIBARNE; E. CABRERA; H. CERECETTO; R. DI MAIO; S. AGUILERA-MORALES; M. MURPHY; M. PAULINO ZUNINI

Estudios de farmacología Molecular de Compuestos Bioactivos en Tripanosomatideos , 2002

Evento: Nacional , X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 2002

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: tripanosomatideos; bioactivos

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

F. IRIBARNE; A. GARCIA OTERO; H. CERECETTO; M. GONZÁLES; S. AGUILERA-MORALES; M. MURPHY; M. PAULINO ZUNINI

Estudios de anclaje de compuestos orgánicos adaptables a los sitios de tripanotiona y glutatión reductasas , 2002

Evento: Internacional , X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 2002

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: anclaje; tripanotiona reductasa; Glutation Reductasa

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

Medio de divulgación: Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; A. GARCIA OTERO; E. ALVAREDA; E. CABRERA; H. CERECETTO; R. DI MAIO; S. AGUILERA-MORALES; M. MURPHY; C. GASTELLU

Molecular pharmacology studies on anti-trypanosomal active compounds , 2002

Evento: Internacional , XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) , 2002

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: anti-trypanosome

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; A. GARCIA OTERO; H. CERECETTO; S. AGUILERA-MORALES; M. MURPHY

Docking studies of nitrofurán compounds in trypanothione and glutathione reductases active sites: A graphical analysis , 2002

Evento: Internacional , XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) , Montevideo , 2002

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: trypanothione reductase; glutathione reductase

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

F. IRIBARNE; A. GARCIA OTERO; E. ALVAREDA; S. AGUILERA-MORALES; M. PAULINO ZUNINI

Estudios de docking de compuestos fenotiazínicos en tripanotiona y glutatión reductasa: Un análisis gráfico , 2002

Evento: Nacional , la Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular , Montevideo , 2002

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: fenotiazinas; Glutation Reductasa; tripanotiona reductasa

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

Medio de divulgación: Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

E. ALVAREDA; F. IRIBARNE; A. GARCIA OTERO; A.O.M STOPPANI; M. PAULINO ZUNINI

Relaciones Estructura-Actividad para o-naftoquinonas tripanocidas , 2002

Evento: Local , la Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular , Montevideo , 2002

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: o-naftoquinonas; QSAR

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

F. IRIBARNE; M. PAULINO ZUNINI; S. AGUILERA-MORALES; A.O.M STOPPANI

Estudio de docking de derivados fenotiazinicos en los sitios activos de tripanotiona reductasa y glutathion reductasa , 2001

Evento: Internacional , XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) , Toulouse Francia , 2001

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: fenotiazinas; tripanotiona reductasa; Glutathion Reductasa

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

Medio de divulgación: Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; S. AGUILERA-MORALES; M. MURPHY; O. TAPIA

Estudios de docking y dinámica molecular en los sitios de unión de tripanotiona reductasa y glutathion reductasa , 2000

Evento: Internacional , XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) , Caxambu. Minas Gerais. Brasil , 2000

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: docking; dinámica molecular; tripanotiona reductasa; Glutathion Reductasa

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; M. HANSZ; J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR; I. CARACELLI; G. SEOANE; H. CERECETTO; C. OLEA-AZAR; A.O.M STOPPANI; M. BERRIMAN; A.H. FAIRLAMB ; O. TAPIA

Diseño asistido por computadora de compuestos tripanosomatideos potencialmente activos , 2000

Evento: Internacional , XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) , Caxambú-Minas Gerais - Brasil , 2000

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: anti-tripanosoma

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

F. IRIBARNE; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

Proton relays at the N-site and C-site of glutathione reductase. Molecular electronic antecedents for a sequentially-ordered mechanism , 1998

Evento: Internacional , Third European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics , Granada - Spain , 1998

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: proton relay; trypanothione reductase N-site; glutathione reductase C-site

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

Medio de divulgación: Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; P. ESPERÓN; M. VEGA; M. VITAL; C. SCAZZOCCHIO

Theoretical and experimental studies of interaction between CreA and DNA target in *Aspergillus nidulans* , 1998

Evento: Internacional , VII Congreso Iberoamericano de Biología Celular , Montevideo , 1998

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: CreA; DNA; *Aspergillus nidulans*

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

Resumen

J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR; M. PAULINO ZUNINI; I. CARACELLI; M. HANSZ; H. CERECETTO; G. SEOANE; R. DI MAIO; O. TAPIA

Crystal structure of trypanothione analogues designed to fit the active site: Comparison between optimized and docked structures , 1997

Evento: Nacional , 20a Reuniao Anual. SBQ , Pocos das Caldas - Brasil , 1997

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: crystal structure; trypanothione reductase; docking

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

Medio de divulgación: Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; N. HIKICHI; M. HANSZ; M. VEGA; O. TAPIA

Structural Aspects of Specificity in Trypanothione and Glutathione Reductase Binding Sites and the design of new compounds with potential and trypanosomal activity , 1997

Evento: Internacional , 6th COST meeting on Anti Parasite Chemotherapy , Leuven - Belgium , 1997

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: trypanothione reductase; glutathione reductase; *Trypanosoma cruzi*

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; I. CARACELLI; M. HANSZ; F. FROLOW; H. CERECETTO; G. SEOANE; O. TAPIA

Crystal structures of trypanothione analogues designed to fit the active site: Comparison between optimized geometries and docked structures , 1997

Evento: Internacional , 6th COST meeting on Anti Parasite Chemotherapy , Leuven - Belgium , 1997

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: crystal structure; docking; trypanothione analogues

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

Resumen

R. DI MAIO; M. PAULINO ZUNINI; G. SEOANE; H. CERECETTO; C. OLEA-AZAR; M. HANSZ; O. TAPIA

Activity Physicochemical Properties relationships of Nitrofurans Analogues , 1997

Evento: Nacional , 20a Reuniao Anual. SBQ , Pocos das Caldas - Brasil , 1997

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: nifurtimox; QSAR

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; R. DI MAIO; G. SEOANE; H. CERECETTO; M. RISSO; A. DENICOLA; C. QUIJANO; G. PELUFFO; M.A. BASSOMBRIO

Síntesis de Potenciales Inhibidores de Trypanothione Reductasa. Semicarbazonas de Furfural y de Tiofencarbaldehído. , 1997

Evento: Nacional , XI Simposio de Investigadores ARgentinos de Química Orgánica , Córdoba - Argentina , 1997

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: semicarbazonas; tiofenilcarbaldehído; tripanotiona reductasa

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE

Possible role of proton relays in the electronic mechanism of glutathione reductase , 1997

Evento: Nacional , IX Simposio Brasileiro de Química Teórica , Caxambú - Brasil , 1997

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: proton relay; glutathione reductase

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

I. CARACELLI; M. PAULINO ZUNINI; M. HANSZ; F. IRIBARNE; H. CERECETTO; R. DI MAIO; G. SEOANE; J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR; O. TAPIA

Complexes of T. cruzi: Trypanothione Reductase and 5-nitrofurán derivatives, a theoretical study , 1997

Evento: Nacional , XIV Reuniao da Sociedade Brasileira de Cristalografía , Sao Carlos - Brasil , 1997

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: nitrofuranos; trypanothione reductase; Trypanosoma cruzi

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

H. CERECETTO; R. DI MAIO; M. GONZALEZ; A. DENICOLA; G. PELUFFO; C. QUIJANO; AM. ATRIA; C. OLEA-AZAR; M. HANSZ; M. PAULINO ZUNINI

Activity-physicochemical properties relationships of nifurtimox analogues , 1997

Evento: Internacional , 1 st Congress of Pharmaceutical Sciences , Ribeirão Preto - SP - Brasil , 1997

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: SAR; chagas; nifurtimox

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR; G. FINAI; M. PAULINO ZUNINI; I. CARACELLI; M.T.C. BARCELLOS; A. DA CUNHA PINTO

Crystal structure of 7-trifluoromethyl-isatin , 1996

Evento: Internacional , 19a Reuniao Anual da SBQ , Sao Paulo , 1996

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: 7-trifluormrthyl isatin; crystal structure

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

J ZUCKERMANN-SPECTOR; M. PAULINO ZUNINI; I. CARACELLI; M. HANSZ; H. CERECETTO; R. DI MAIO; G. SEOANE; O. TAPIA

Crystal Structure and Targeted designed trypanothione analogues: A comparison , 1996

Evento: Internacional , WATOC , Jerusalem Israel , 1996

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: trypanothione reductase; crystal

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI

Estudios Dinámicos del mutante G446G de la enzima glutathione reductasa , 1995

Evento: Nacional , VII Jornadas Científicas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 1995

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: Glutathione Reductasa; dinámica molecular

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

Medio de divulgación: Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; G. SEOANE; H. CERECETTO; M. GONZÁLES; R. DI MAIO; G. IBARRURI

Obtención de nuevas drogas con posible actividad antichagásica , 1995

Evento: Nacional , VII Jornadas Científicas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 1995

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: antichagasicas

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; N. HIKICHI; M. HANSZ; M. VEGA; O. TAPIA

Comparison of glutathione reductase and trypanothione reductase binding sites , 1995

Evento: Internacional , XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Pucon - Chile , 1995

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: glutathione reductase; trypanothione reductase

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. HANSZ; M. PAULINO ZUNINI; M.P. MOLINA PORTELA; S.H. FERNÁNDEZ-VILLAMIL ; A.O.M STOPPANI

Estructura-actividad en naftoquinonas , 1995

Evento: Internacional , XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Pucon - Chile , 1995

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: o-naftoquinonas; QSAR

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; G. ROXSTROM; I. VELAZQUEZ; O. TAPIA

Perturbation-relaxation molecular dynamics simulations of zinc-finger protein ZIF268 , 1995

Evento: Internacional , XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Pucon - Chile , 1995

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: molecular dynamics; ZIF268; Zinc finger

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

N. HIKICHI; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

Molecular dynamics study of mutant G418W of glutathione reductase , 1995

Evento: Internacional , XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Pucon - Chile , 2995

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: GR G418W; molecular dynamics

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

Medio de divulgación: Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; A. ESTÉVES; B. DELLAGIOVANNA; G. TABARES; R. EHRLICH

A developmentaly gene of Echiococcus granulosis codes for a 1.5. kilodalton polypeptide related to fattu acid binding protein , 1994

Evento: Internacional , Santiago Southern Summer Syposium , Santiago de Chile , 1994

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: Echinococcus granulosis; FABPs

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; M. HANSZ; N. HIKICHI; G. TABARES; M.P. MOLINA PORTELA; S.H. FERNANDEZ-VILLAMIL; A.O.M STOPPANI

Relacion Estructura-Actividad en naftoquinonas lipofilicas , 1994

Evento: Nacional , XX Congreso Argentino de Química , Cordoba - Argentina , 1994

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: o-naftoquinonas; QSAR

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; D. OFSIEVICH; O. TAPIA

Interacción de 2,4,6-trinitrobencensulfonato con glutation reductaa , 1993

Evento: Internacional , I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana , Montevideo , 1993

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: 2,4,6.trinitrobencensulfonato; glutathione reductase

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

Medio de divulgación: Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI; M. HANSZ; F. STAMATO; O. TAPIA

Comparación de los sitios de unión en glutatión reductasa y tripanotiona reductasa , 1993

Evento: Internacional , I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana , Montevideo , 1993

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: tripanotiona reductasa; Glutation Reductasa

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; M. KANN; O. TAPIA

Unión de nitrofuranos con sustituyentes tipo espermidina y tripanotiona reductasa , 1993

Evento: Internacional , I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana , Montevideo , 1993

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: espermidina; tripanotiona reductasa

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

Medio de divulgación: Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI; M. HANSZ; O. TAPIA

Dinamica molecular de glutatión reductasa en el diseño de drogas antichagasicas selectivas , 1993

Evento: Internacional , I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana , Montevideo , 1993

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: dinámica molecular; Glutation Reductasa; antichagasicas

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI; M. HANSZ; F. STAMATO; A.O.M STOPPANI

Relaciones estructura-actividad y binding a glutatión reductasa de naftoquinonas , 1993

Evento: Internacional , I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana , Montevideo , 1993

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: o-naftoquinonas; Glutation Reductasa; QSAR

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

N. HIKICHI; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

A molecular dynamics study of the structure of glutathione reductase , 1993

Evento: Nacional , VI Simposio Brasileiro de Química Teórica , Caxambú - Brasil , 1993

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: molecular dynamics; glutathione reductase

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

Medio de divulgación: Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; M. VEGA; F. IRIBARNE; O. TAPIA

Study of disulfide specificity in Trypanothione reductase , 1993

Evento: Nacional , VII Simposio Brasileiro de Química Teórica , Caxambú - Brasil , 1993

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: disulfide; trypanothione reductase

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

Computer simulations and molecular graphics modelling. The 3D structures of transport proteins , 1993

Evento: Internacional , The International Workshop on biology of Parasitism , Maldonado - Solis , 1993

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: molecular graphics modelling; 3D structures; transport proteins; parasitism

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

Medio de divulgación: Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; A. ESTÉVES; B. DELLAGIOVANNA; G. TABARES; R. EHRLICH; O. TAPIA

Molecular Modelling and Dynamics of EgDF1 , 1993

Evento: Internacional , The International Workshop on biology of Parasitism , Maldonado - Solis , 1993

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: EgDf1; molecular dynamics; fatty acid; carrier proteins

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; M. VEGA; G BOUGARIN; O. TAPIA

Estudio de la especificidad de sustratos disulfuro de tripanotiona reductasa , 1993

Evento: Internacional , I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana , Montevideo , 1993

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: tripanotiona reductasa

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; M. VEGA; G BOUGARIN; O. TAPIA

Study of substrate specificity in trypanothione reductase, , 1993

Evento: Internacional , VII Simposio Brasileiro de Química Teórica , Caxambú – Brasil , 1993

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: disulfide specificity

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

Resumen

G. SEOANE; H. CERECETTO; M. GONZÁLES; M. PAULINO ZUNINI

Synthesis of possible inhibitors of the trypanothione reductase trypanocidal activity , 1992

Evento: Nacional , I Jornada de pesquisa da AUGM , Santa Maria , 1992

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: inhibitors; trypanothione reductase

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; M. HANSZ; N. HIKICHI; G. TABARES; M.N. FADEL; L. CADENAZZI; A.O.M STTOPPANI

Relación estructura actividad de alfa-lapachona y o-naftoquinonas relacionadas , 1991

Evento: Regional , Congreso Latinoamericano de Parasitología. I Congreso Uruguayo de Parasitología , Buenos Aires , 1991

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: alfa-lapachona; o-naftoquinonas; QSAR

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI

Propiedades dependientes de las estructuras electrónicas de los nitrofuranos y su correlación con las actividades biológicas , 1991

Evento: Local , II Seminario Taller del Programa de Biología Parasitaria , 1991

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: nitrofuranos; QSAR

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI

Modelado molecular de flavoproteínas relacionadas con el metabolismo del Trypanosoma y huéspedes mamíferos: Glutation Reductasa, Lipoamida Deshidrogenasa y Tripanotiona Reductasa , 1991

Evento: Local , II Seminario Taller del Programa de Biología Parasitaria , 1991

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: glutathione reductase; trypanothione reductase; lipoamide deshydrogenase

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

E. CIVILA; R. SALVATELLA; R. MANCEBO; R. ROSA; Y. BADMAJIAN; G. MENDARO; M. FERNANDEZ; H. CERECETTO; S. ONETTO; M. PAULINO ZUNINI; A.O.M STTOPPANI

Accion de nitrofuranos de síntesis sobre modelo murino de infección por T. cruzi , 1991

Evento: Local , II Seminario Taller del Programa de Biología Parasitaria , Montevideo , 1991

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: nitrofuranos; Trypanosoma cruzi; Modelo Murino

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

E. HORJALES; F. STAMATO; M. PAULINO ZUNINI

Comparacao dos sitios activos e relacao entre os idstintos mecanismos de acao das enzimas tripanotiona reductase, gluationa reductase e lipamida desidrogenase , 1991

Evento: Nacional , 14a Reunioao Anual da Sociedade Brasileira de Química , Caxambú - Brasil , 1991

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: glutathione reductase; trypanothione reductase; lipoamide deshydrogenase

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. HANSZ; N. HIKICHI; M. PAULINO ZUNINI; A.O.M STOPPANI

Modelado Molecular de Nitrofuranos empleando métodos mecánico moleculares y químico-cuánticos. Comparación con datos cristalográficos , 1991

Evento: Nacional , VI Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 1991

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: nitrofuranos; Mecanica Molecular; Mecanica Cuántica

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

N. HIKICHI; M. HANSZ; M. PAULINO ZUNINI

Gráficos moleculares: Aplicación al Estudio Comparativo de Flavoproteínas , 1991

Evento: Nacional , VI Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 1991

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: Graficos Moleculares; Flavoproteinas

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; M. HANSZ; N. HIKICHI; A.O.M STOPPANI

Electronic properties and free radical production by nitrofurans compounds , 1991

Evento: Internacional , International Symposium of Active Oxygen Species and Human Health , Buenos Aires , 1991

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: nitrofurans; free radicals; electronic properties

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

E. HORJALES; F. STAMATO; B. OLIVA; M. PAULINO ZUNINI; O. NILSSON; M.J. AMBROSSIO; O. TAPIA

Trypanothione Reductase - NADPH complex: Model building and docking studies of nitrofurans inhibitors , 1991

Evento: Nacional , VI Simposio Brasileiro de Química Teórica , Caxambú - Brasil , 1991

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: trypanothione reductase; docking; nitrofurans

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

E. HORJALES; B. OLIVA; F. STAMATO; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

A Computer Modelling Study of the Interactions between NADPH and the Flavoenzymes Glutathione-Reductase and Trypanothione Reductase , 1991

Evento: Nacional , VI Simposio Brasileiro de Química Teórica , Caxambú - Brasil , 1991

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: NADPH; glutathione reductase; trypanothione reductase

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI

Comparación de datos cristalográficos con la estructura obtenida utilizando diversos campos de fuerza para el Glutati6n (GSH) , 1990

Evento: Internacional , XIX Congreso Latinoamericano de Química , Buenos Aires , 1990

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: Glutathione; campos de fuerza

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. DUBIN; S.H. FERNÁNDEZ-VILLAMIL ; M. PAULINO ZUNINI; A.O.M STTOPPANI

Inhibici6n por nitrofuranos de la lipoperoxidaci6n microsomal hepática y reacciones catalizadas por el citocromo P-450 , 1990

Evento: Internacional , Congreso Latinoamericano de Farmacología , Montevideo , 1990

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: lipoperoxidaci6n microsomal hepática; nitrofuranos

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

Resumen

H. CERECETTO; M. GONZÁLES; M. HANSZ; N. HIKICHI; S. ONETTO; F. ZINOLA; M. PAULINO ZUNINI

Potencialidad t6xica del Nifurtimox y análogos, su relaci6n con el potencial formal del par R-NO₂- R-NO₂ y densidad electrónica en el grupo nitro , 1990

Evento: Internacional , Congreso Argentino de Protozoología y Reuni6n sobre Enfermedad de Chagas , Buenos Aires , 1990

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: nifurtimox; potencial formal

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

Medio de divulgaci6n: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; M. HANSZ; N. HIKICHI; A.O.M STTOPPANI

Generaci6n de Radicales Aniones: Correlaciones Estructura-Actividad para Nitrofuranos , 1990

Evento: Regional , XIX Congreso Latinoamericano de Química , Buenos Aires , 1990

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: nitrofuranos; QSAR

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

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI; M. HANSZ

Inhibición de Glutathión Reductasa: Correlación Estructura-Actividad para 5-Nitrofuranos , 1990

Evento: Regional , XIX Congreso Latinoamericano de Química , Buenos Aires , 1990

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: Glutation Reductasa; QSAR; nitrofuranos

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

E. CIVILA; R. SALVATELLA; R. MANCEBO; R. SOSA; Y. BADMAJIAN; G. MENDARO; M. FERNANDEZ; H. CERECETTO; S. ONETTO; M. PAULINO ZUNINI; A.O.M STTOPPANI

Accion de Nitrouranos de Síntesis sobre Modelo Murino de Infección por Trypanosoma cruzi , 1990

Evento: Regional , Congreso Argentino de Protozoología y Reunión sobre Enfermedad de Chagas , Buenos Aires , 1990

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: Modelo Murino; nitrofuranos; Trypanosoma cruzi

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

Medio de divulgación: Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI; M. HANSZ

Comparison of Gluathione and Trypanothione Reductase-Ligand interactions: X-Ray Crystallography and Molecular Mechanics on Struture-Activity Analysis. , 1990

Evento: Internacional , International Symposium on Crystallography and Molecular Biology , Sao Paulo , 1990

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: glutathione reductase; trypanothione reductase

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; E. HORJALES

Docking Studies on inhibition of Glutathione Reductase by Nitrofurans: its Relation with the ACtive Site of Trypanothione Reductase , 1990

Evento: Internacional , International Symposium on Crystallography and Molecular Biology , Sao Paulo , 1990

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: docking; glutathione reductase; nitrofurans

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

E. HORJALES; M. PAULINO ZUNINI

Binding Site of Nitrofurans Derivatives into the Active Site of Gluathione and Trypanothione Reductase Modelled using Docking Methods and Molecular Mechanics , 1990

Evento: Internacional , International Symposium on Crystallography and Molecular Biology , 1990

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: Binding Site; nitrofurans; glutathione reductase; trypanothione reductase

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

Medio de divulgación: Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI

Comparación de datos cristalográficos con la estructura obtenida utilizando diversos campos de fuerza para el Glutati6n (GSH) , 1990

Evento: Internacional , XIX Congreso Latinoamericano de Qu4mica , Buenos Aires , 1990

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: campos de fuerza; Glutation

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Qu4micas / F4sico-Qu4mica, Ciencia de los Pol4meros, Electroqu4mica / Medicina Qu4mica

Medio de divulgaci6n: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; B. MESTER; G SERRA; RM CLARAMUNT; AOM STOPPANI

Estudio de la Relacion de Estructura-Actividad para derivados del 5-nitrofurano usando t4cnicas cromatogr4ficas y computacionales. II congreso Latinoamericano de Cromatograf4a. Buenos Aires. Octubre 1988. , 1990

Evento: Internacional

Palabras clave: HPLC; 5-nitrofurano

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Qu4micas / F4sico-Qu4mica, Ciencia de los Pol4meros, Electroqu4mica / Medicina Qu4mica

Completo

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI; M. HANSZ; O.N. VENTURA

Comparaci6n de datos Cristalogr4ficos para la Estructura del Glutati6n con C4lculos Mec4nico Moleculares , 1989

Evento: Internacional , XVIII Congreso Internacional de Qu4micos Te6ricos de Expresi6n Latina , La Plata Argentina , 1989

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Qu4micas / F4sico-Qu4mica, Ciencia de los Pol4meros, Electroqu4mica / Bioinformatica Estructural, Extracci6n, analisis e identificaci6n de carotenoides

Medio de divulgaci6n: Papel;

Resumen

N. HIKICHI; H. CERECETTO; S. ONETTO; B. MESTER; M. PAULINO ZUNINI

Estudio de la Relaci6n Estructura Actividad para derivados del 5-nitrofurano utilizando t4cnicas cromatogr4ficas y computacionales. Parte II. , 1989

Evento: Internacional , IV Reuni6n Latinoamericana de Ciencias Farmac4uticas , Buenos Aires , 1989

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: nitrofuranos; in silico; HPLC; chaga's disease

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Qu4micas / F4sico-Qu4mica, Ciencia de los Pol4meros, Electroqu4mica / Bioinformatica Estructural, Qu4mica M4dica

Medio de divulgaci6n: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI; M. HANSZ; F. STAMATO

Modelado te6rico de la estructura del Glutati6n oxidado generado por Mec4nica Molecular , 1989

Evento: Internacional , V Simposio Brasileiro de Qu4mica Te6rica , Caxamb4 - Brasil , 1989

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: Glutation; Mecanica Molecular

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Qu4micas / F4sico-Qu4mica, Ciencia de los Pol4meros, Electroqu4mica / Bioinformatica Estructural, Qu4mica M4dica

Medio de divulgaci6n: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; P RAIMONDA; S LONATI

Estudio teórico de la correlación estructura-actividad para éteres halogenados anestésicos o convulsivantes , 1987

Evento: Internacional , 4º Congreso Argentino de Farmacia y Bioquímica Industrial , Buenos Aires , 1987

Palabras clave: anestésicos

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

Resumen

M. PAULINO ZUNINI

Theoretical studies of the molecular complexes between hidroxamics and boric acids. , 1987

Evento: Internacional , IV Simposio Brasileiro de Química Teórica , Caxambú. Minas Gerais. Brasil , 1987

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: hydroxamic acids

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; J RAMA; A IGLESIAS; ON VENTURA

Estudio teórico de la correlación estructura-actividad para hidrocarburos halogenados con actividad anestésica , 1986

Evento: Internacional , III Reunión Latinoamericana de Ciencias Farmacéuticas , Montevideo , 1986

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: anestésicos

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

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; A IGLESIAS; RM SOSA

Estructura electronica de acidos hidroxamicos y algunos derivados , 1983

Evento: Internacional , Tercer Congreso Argentino de Físico Química , La Plata Argentina , 1983

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

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

Medio de divulgación: Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; A IGLESIAS; ON VENTURA

Estudios sobre la potencia anestésica de haloetanos I. Investigación teórica de relaciones estructurales , 1983

Evento: Internacional , Tercer Congreso Argentino de FísicoQuímica , La Plata, Argentina , 1983

Anales/Proceedings: Arbitrado: SI

Palabras clave: haloetanos

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

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; RM SOSA

Estudio Mecánico Cuántico de las conformaciones y espectros electrónicos de algunos ácidos hidroxámicos y sus iones , 1979

Evento: Internacional , Jornadas Química. Cincuentenario de la Facultad de Química , Montevideo , 1979

Palabras clave: ácidos hidroxámicos

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

Medio de divulgación: Papel;

Texto en periódicos

Revista
M. PAULINO ZUNINI
PROVITIS: UN CONSORCIO ENTRE LA CIENCIA Y LA PRODUCCIÓN , VOCES TECNOLÓGICAS , v: , p: , 2015
Palabras clave: propóleos; orujos de uvas
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de Fitonutrientes
Lugar de publicación: MONTEVIDEO;

Revista
M. PAULINO ZUNINI
Científicos Uruguayos contra el Mal de Chagas. Reportaje a cargo de Nelson Días. , Caras y Caretas , v: , p: , 2005
Palabras clave: chagas
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química
Medio de divulgación: Papel; *Lugar de publicación:* Montevideo;

Revista
M. PAULINO ZUNINI
Propiedades fitonutrientes y fitoterapéuticas de hierbas medicinales y productos naturales , Caras y Caretas , v: , p: , 2004
Palabras clave: fitonutrientes; fenoles
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química
Medio de divulgación: Papel; *Lugar de publicación:* Montevideo;

Revista
M. PAULINO ZUNINI
Mal de Chagas, Mal de Muchos. Nuevos Fármacos para Combatirlo, , Cuadernos de Marcha. Tercera Epoca, Año VIII , v: 76 , p: 1010 , 1982
Palabras clave: Mal de Chagas
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química
Medio de divulgación: Papel; *Lugar de publicación:* Montevideo;

Evaluaciones

Evaluación de Proyectos
2014 / 2014
Institución financiadora: CSIC
Cantidad: Menos de 5
CSIC

Evaluación de Proyectos
2012 / 2012
Institución financiadora: Agencia Nacional de Investigacion e Innovación - Llamado Fondos Clemente Estable
Cantidad: Menos de 5
Agencia Nacional de Investigacion e Innovación - Llamado Fondos Clemente Estable , Uruguay

Evaluación de Proyectos
2009 / 2009
Institución financiadora: FOCANLIS
Cantidad: Menos de 5
FOCANLIS , Argentina

Evaluación de Proyectos
2005 / 2005
Institución financiadora: IFS
Cantidad: Menos de 5
IFS , Suecia

Evaluación de Eventos

2010

Nombre: Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias. Maldonado, Piriápolis. Mayo 2010., Uruguay

Evaluación de Publicaciones

2013 / 2013

Nombre: Current Topics in Medicinal Chemistry,

Cantidad: Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2011 / 2011

Nombre: Journal of Biomedicine and Biotechnology,

Cantidad: Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2008 / 2014

Nombre: Journal of Chilean Chemistry Society,

Cantidad: De 5 a 20

Evaluación de Publicaciones

2005 / 2011

Nombre: Journal of Molecular Modeling,

Cantidad: De 5 a 20

Evaluación de Publicaciones

2003 / 2003

Nombre: Journal of Molecular Structure,

Cantidad: Menos de 5

Formación de RRHH

Tutorías concluidas

Posgrado

Tesis de maestría

Dinámica Molecular en GPU aplicada a complejos membrana-proteína-ligando , 2014

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: Yamandú Gonzáles

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Bioinformática (UDELAR-PEDECIBA)

Palabras clave: Dinámica Molecular Graphic Processor Unit

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

Tesis de maestría

Identificación de los blancos de acción molecular de flavonoides mediante tamizaje virtual en librerías de estructuras tridimensionales de proteínas , 2013

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Diego Carvalho

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Bioinformática

Palabras clave: flavonoides; blancos de acción ; tamizaje virtual

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, análisis conformacional

Medio de divulgación: Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

Tesis de doctorado

Modelado y estudio de complejos de Ciclosporina A y compuestos relacionados con una ciclofilina de Trypanosoma cruzi , 2013

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Roberto Carraro

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

Palabras clave: bioinformática estructural

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

Medio de divulgación: Papel, País/Idioma: Uruguay/Español

Tesis de doctorado

Relación Estructura-Actividad de Polifenoles: Desarrollo y Aplicación de Técnicas de Farmacología Molecular y Estudios de Unión a Blancos Involucrados en los Mecanismos de Acción , 2011

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Elena Alvareda Migliaro

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química

Palabras clave: oxidoreductasas; quinonas; fenoles

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel, País/Idioma: Uruguay/Español

Tesis de doctorado

Diseño Racional y caracterización farmacológica de nuevos agonistas nicotínicos derivados de la cistina , 2010

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Juan Andrés Abin Carriquiry

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química

Palabras clave: agonistas nicotínicos cistina

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de agonistas nicotínicos del nAChR

Medio de divulgación: Papel, País/Idioma: Uruguay/Español

Tesis de doctorado

“Interacciones moleculares de ligandos a las flavoenzimas glutation reductasa, tripanotiona reductasa y lipoamida deshidrogenasa , 2005

Tipo de orientación: **Tutor único o principal**

Nombre del orientado: **Federico Iribarne**

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

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

***Medio de divulgación:* Papel, País/Idioma: Uruguay/Español**

Tesis de doctorado

Estudio de las interacciones del represor CreA con el ADN en Aspergillus nidulans , 2000

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Patricia Esperón

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

Palabras clave: Aspergillus nidulans

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Simulaciones de Dinámica Molecular, Modelado Biomolecular

Medio de divulgación: Papel, País/Idioma: Uruguay/Español

Tesis de maestría

Modelado molecular y estudios de mecanismos de acción de proteínas asociadas a enfermedades parasitarias". Defensa de Tesis , 1999

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Mauricio Vega

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Papel, País/Idioma: Uruguay/Español

Tesis de maestría

Bases Moleculares de la reactividad de flavoenzimas hacia drogas y ligando , 1998

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Federico Iribarne

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

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

Medio de divulgación: Papel, País/Idioma: Uruguay/Español

Grado

Tesis/Monografía de grado

Carotenoides en hojas de cítricos: caracterización in vitro , 2013

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Valentina Velazco

Universidad ORT Uruguay - Facultad de Ingeniería , Uruguay , Licenciatura en Biotecnología

Palabras clave: carotenoides, bioinformática

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

Medio de divulgación: Papel, País/Idioma: Uruguay/Español

Tesis/Monografía de grado

Desarrollo y caracterización de antioxidantes encapsulados a partir de orujos de uva , 2012

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Marcela Pearce

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Ingeniería de Alimentos

Palabras clave: antioxidantes, orujos de uva tannat, fenoles

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Desarrollo de extractos antioxidantes a partir de desechos industriales

Medio de divulgación: Papel, País/Idioma: Uruguay/Español

Tesis/Monografía de grado

Desarrollo y caracterización de antioxidantes encapsulados a partir de orujos de uva , 2012

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Antonella Roascio

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Ingeniería de Alimentos

Palabras clave: antioxidantes, orujos de uva tannat, liposomado

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Liposomas de extractos antioxidantes encapsulados a partir de desechos industriales

Medio de divulgación: Papel, País/Idioma: Uruguay/Español

Tesis/Monografía de grado

ANÁLISIS IN VITRO E IN SILICO DE LA ACTIVIDAD INHIBITORIA SOBRE XANTINA OXIDASA, Y ANÁLISIS DE LA CAPACIDAD CAPTADORA DE RADICALES LIBRES DE EXTRACTOS ETANÓLICOS DE PROPÓLEOS PROVENIENTES DE URUGUAY , 2011

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Yisel Rodríguez

Univ Católica Del Norte , Chile , Tesis de Grado para obtener el Título de Químico Farmacéutico

Palabras clave: antioxidantes, fenoles

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel, País/Idioma: Chile/Español

Información adicional: Esta tutoría se realizó durante mi estadía sabática en la UCN Chile y defendida por la estudiante luego de mi regreso, en el 2011.

Tesis/Monografía de grado

Estudio In Silico de los efectos de lactonas sesquiterpénicas en el Factor Nuclear kappa B (NF- κ B) , 2009

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Luis Alejandro Castro

Univ Católica Del Norte , Chile , Tesis de Grado para obtener el Título de Químico Farmacéutico

Palabras clave: lactonas sesquiterpénicas antitumorales

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas anticancerígenas

Medio de divulgación: Papel, *País/Idioma:* Chile/Español

Tesis/Monografía de grado

Perfil polifenólico de extractos de propóleos uruguayos por HPLC y estudios de anclaje molecular (docking) con xantina oxidasa , 2008

Nombre del orientado: Cristhian Rojas

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Bachiller en Química

Palabras clave: flavonoides, antioxidantes, docking

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular, Fitofarmacia

Medio de divulgación: Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

Tesis/Monografía de grado

Estructura De Polifenoles Presentes En Marcela Y Propóleos Y Su Relación Con Biomoléculas Involucradas En El Estrés Oxidativo , 2006

Nombre del orientado: Manuel Cedrés

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Química

Palabras clave: flavonoides, antioxidantes, QSAR

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular, Fitofármacos, Nutracéuticos

Medio de divulgación: Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

Tesis/Monografía de grado

Estructura de Polifenoles presentes en Productos Naturales y su relación con Biomoléculas involucradas en el stress oxidativo , 2006

Nombre del orientado: Loreto Calderón Cárdenas

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Bachiller en Química

Palabras clave: flavonoides, productos naturales, QSAR, docking

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular, Fitofármacos, Nutracéuticos

Medio de divulgación: Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

Otras

Iniciación a la investigación

Desarrollo y caracterización de un producto antiinflamatorio en base a liposomas de orujo de uvas , 2013

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Pablo Miranda Fierro

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay

Palabras clave: orujos de uvas, antioxidantes, nanotecnología

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de extractos antioxidantes encapsulados a partir de desechos industriales

Medio de divulgación: Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

Información adicional: La orientación del estudiante se está haciendo con la co-tutoría de la Dra Helena Pardo del centro NANOMAT del Polo Tecnológico de la Facultad de Química

Tutorías en marcha

Posgrado

Tesis de maestría

Caracterización genómica y proteómica de dioxigenasas responsables del clivaje de carotenoides de especies de citrus , 2016

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Jorge Cantero

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Bioinformática

Palabras clave: citrus; oxidasas de carotenoides

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Postgrados en Bioinformática

País/Idioma: Uruguay/Español

Tesis de doctorado

Estudio de fenoles con actividad antioxidante y antiinflamatoria y su vinculación con el factor de transcripción NF- κ B , 2015

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Emiliana Fariña

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

Palabras clave: NF- κ B; propóleos; orujos de uvas

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de Fitonutrientes

Medio de divulgación: Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

Tesis de maestría

Anclaje Reverso aplicado al descubrimiento de nuevos blancos para el desarrollo de antichagásicos , 2014

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Brenda Vera

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas , Uruguay , Maestría en Bioinformática

Palabras clave: Anclaje reverso; o-quinona; Chagas disease

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

País/Idioma: Uruguay/Español

Tesis de maestría

Screening Virtual, Farmacóforo, QSAR, docking y dinámica molecular de análogos de agonistas nicotínicos en modelos de receptores nicotínicos de acetilcolina , 2011

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Gustavo Silva Bueno

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Bioinformática (UDELAR-PEDECIBA)

Palabras clave: in silico, nicotínicos

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de agonistas nicotínicos del nAChR

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

Grado

Tesis/Monografía de grado

Estudios experimentales y diseño biomolecular de inhibidores de xantina oxidasa , 2007

Nombre del orientado: Magdalena Dalmás

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Química

Palabras clave: xantina oxidasa

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Docking, Modelado Biomolecular, inhibición enzimática, flavonoides

Medio de divulgación: Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

Otros datos relevantes

Premios y títulos

2009 Investigador Nivel II del Sistema Nacional de Investigaciones (Nacional) Agencia Nacional de Investigación e Innovación

Jurado/Integrante de comisiones evaluadoras de trabajos académicos

Tesis

Candidato: Laura Inés Lafón Hughes

M. PAULINO ZUNINI

Tesis de Maestría en Ciencias Biológicas, opción Neurociencias , 2003

Tesis (Tesis de Maestría en ciencias biológicas, opción Neurociencias) - Ministerio de Educación y Cultura - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Tesis

Candidato: Mariana Boiani

M. PAULINO ZUNINI

Estudio químico y biológico de derivados de N- Óxidos de benzo[1,2 - d]imidazol y aza análogos , 2003

Tesis (Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Tesis

Candidato: Pablo Denis

M. PAULINO ZUNINI

Estudio cinético y termodinámico de reacciones químicas de interés atmosférico , 2000

Tesis (Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Tesis

Candidato: Diego Benítez

M. PAULINO ZUNINI; GAMBINO D; LABADIE

Cribado molecular y fenotípico de compuestos con potencial efecto farmacológico contra enfermedades causadas por tripanosomátidos , 2017

Tesis (Pro.In.Bio Programa Para la Investigación en Ciencias Médicas) - Institut Pasteur de Montevideo - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: Tripanosomiasis, Leishmaniasis

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

Tesis

Candidato: Javier Varela

M. PAULINO ZUNINI

Búsqueda de agentes anti Trypanosoma cruzi en plantas del Uruguay , 2015

Tesis (Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: Trypanosoma cruzi; Plantas del Uruguay

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

Tesis

Candidato: Agustín Correa

M. PAULINO ZUNINI; A BUSCHIAZZO; G GONZÁLEZ; P. AGUIAR; L. COITIÑO

Doctorado en Ciencias Biológicas , 2014

Tesis (Doctorado en Ciencias Biológicas) - Facultad de Ciencias - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: cristalografía

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

Tesis

Candidato: Matias Machado

M. PAULINO ZUNINI

MODELADO MOLECULAR DE PROCESOS RELACIONADOS A LA TRANSCRIPCIÓN DEL VIRUS VIH-1 , 2012

Tesis (Doctorado en Ciencias Biológicas (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Ciencias - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Tesis

Candidato: Mariana Boiani

M. PAULINO ZUNINI

Generación de modelos de clasificación de actividades antichagásicas y estudio de mecanismos de acción: aplicación de la búsqueda de nuevos fármacos anti - Trypanosoma cruzi , 2007

Tesis (Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Tesis

Candidato: Ana Acevedo

M. PAULINO ZUNINI

Eflujo activo de antibióticos mediaa por el sistema MTRH-MtrC-MtrE en Neisseria gonorrhoeae , 2005

Tesis (Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Tesis

Candidato: Pablo Denis

M. PAULINO ZUNINI

Estudio cinético y termodinámico de reacciones químicas de interés atmosférico , 2004

Tesis (Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Candidato: Santiago Deicas

M. PAULINO ZUNINI; E. BOIDO; A MARTÍN

Estudio de la capacidad ANTIOXIDANTE EN VINOS TINTOS URUGUAYOS , 2015

(Ingeniería de Alimentos) - Facultad de Agronomía - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: vino; antioxidantes

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Alimentos

Candidato: Astrid Bradner

M. PAULINO ZUNINI

Modelización estructural de la interacción entre proteína quinasa dependiente de AMPc y la proteína core del virus de Hepatitis C , 2011

(Licenciatura en Bioquímica) - Facultad de Ciencias - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: virus Hepatitis C; proteína quinasa

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Candidato: Marcelo Miraballes Reynoso

M. PAULINO ZUNINI

Influencias de la destilación con vapor en las características fisicoquímicas y sensoriales de extractos acuosos de plantas nativas sudamericanas , 1990

(Ingeniería de Alimentos) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Candidato: Alexandra Castro

M. PAULINO ZUNINI

Análisis de la reactividad intrínseca de nucleobases en secuencias de ADN relevantes frente a la acción de fármacos anticancerígenos (Cisplatino y Mitomicina C) , 1990

(Licenciatura en Bioquímica) - Facultad de Ciencias - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Tesis/Monografía de grado

Candidato: Mauricio Argimón

M. PAULINO ZUNINI

No indica , 2013

Tesis/Monografía de grado () - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Otros tipos

Candidato: Lucia Otero

M. PAULINO ZUNINI

No indica , 2010

Otra participación (Doctorado en Química) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Otros tipos

Candidato: Alicia Merlino

M. PAULINO ZUNINI

No indica , 2007

Otra participación (Doctorado en Química) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Otros tipos

Candidato: Mariana Boiani

M. PAULINO ZUNINI

Generación de modelos de clasificación de actividades antichagásicas y estudio de mecanismos de acción: aplicación de la búsqueda de nuevos fármacos anti - Trypanosoma cruzi , 2006

Otra participación (Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Otros tipos

Candidato: Jorge Gancheff

M. PAULINO ZUNINI

Química en solución acuosa de dioxocomplejos de Re (V) , 2002

Otra participación (Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Presentaciones en eventos

Congreso

Study of the geometrical Isomerization of zeaxanthin by chemical and in silico approaches Gutiérrez-Rodríguez FJ1, Cantero, J2 Mapelli-Brahm, P1, Benítez-González AM1, Stinco CM1, Paulino, M2 , Meléndez-Martínez AJ1 , 2017

Tipo de participación: Otros, *Carga horaria:* 5

Referencias adicionales: Suiza; *Nombre del evento:* ICS Symposium <http://www.icslucerne2017.org/>;

Palabras clave: carotenoides; zeaxanthin; análisis conformacional

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

Congreso

An In Silico Study of the Dioxygenases CCD4 family Substrates in Citrus , 2015

Tipo de participación: Expositor oral, *Carga horaria:* 40

Referencias adicionales: Italia; *Nombre del evento:* CHITEL 2015 Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina; *Nombre de la institución promotora:* Universidad di Torino - Italia

Palabras clave: Dioxygenases; citrus; CCDs; carotenoids; docking; molecular dynamics

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Congreso

Bioinformatics applied to the study of bioactive compounds in foods , 2015

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 20

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Fitoquímicos en Agroalimentación y Salud; *Nombre de la institución promotora:* CYTED - España

Palabras clave: carotenoids; omics; bioinformatics; structural bioinformatics

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Congreso

Bioinformática estructural aplicada al estudio de compuestos bioactivos contenidos en productos naturales , 2012

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 32

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* PRIMER ENCUENTRO RIOPLATENSE DE BIOLOGÍA XIV JORNADAS ANUALES DE LA SOCIEDAD ARGENTINA DE BIOLOGÍA; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Argentina de Biología

Palabras clave: Bioinformática

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, docking

Congreso

BIOINFORMÁTICA ESTRUCTURAL APLICADA AL ESTUDIO DE CAROTENOIDES CONTENIDOS EN PRODUCTOS NATURALES , 2012

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 24

Referencias adicionales: España; *Nombre del evento:* Carotenoides como ingredientes de alimentos funcionales", que se celebrará en la Facultad de Farmacia de la Universidad de Sevilla ente los días 10 y 12 de septiembre de 2012.; *Nombre de la institución promotora:* CYTED España

Palabras clave: carotenoides, bioinformatica

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, docking

Congreso

In silico studies of Echinococcus granulosus FABPs - fatty acids interactions Adriana Esteves^{1,*}and Margot Paulino Zunini^{2,*} , 2011

Tipo de participación: Poster, *Carga horaria:* 24

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* ENAQUI 2011; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Química - PEDECIBA

Palabras clave: Echinococcus granulosus; transportadores de ácidos grasos

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural

Congreso

"Bioinformatica y Diseño de Drogas". Mesa de Bioinformática. Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias. Maldonado, Piriápolis. Mayo 2010. , 2010

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 24

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Uruguaya de Biociencias

Palabras clave: bioinformática estructural

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Congreso

Estudios de fenoles presentes en propóleos , 2007

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Simposio satélite "Apterapia". ; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Veterinaria

Palabras clave: propóleos

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

M. Paulino Zunini. Montevideo

Congreso

La enfermedad de Chagas. , 2006

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* A la puerta de los 100 años del conocimiento de una endemia americana ancestral. Balance y futuro, 1909-2006. Chagas, hacia el Siglo XXI.; *Nombre de la institución promotora:* Instituto Mario Fatała Chabén

Palabras clave: Enfermedad de Chagas

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

M. Paulino Zunini. Buenos Aires

Congreso

Estudios QSAR de polifenoles presentes en mieles y propóleos. , 2005

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Primer Congreso de Apicultura del Mercosur; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Apícola Uruguaya

Palabras clave: bioinformática estructural

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

Elena Alvareda, Manuel Cedrés Fernández, Lorena Shöderle, Cecilia Matonte, Loreto Calderón, Margot Paulino Zunini, 24-29 junio 2005. Punta del Este, Maldonado, Uruguay.

Congreso

Relaciones Estructura-Actividad para o-naftoquinonas tripanocidas , 2002

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Ciencias

Palabras clave: bioinformática estructural

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

E. Alvareda, F. Iribarne, A. García, A.O.M. Stoppani, M. Paulino, 29-30 november 2002, Montevideo-URUGUAY .

Congreso

Estudios de docking y PCA de fenotiazinas en los sitios activos de tripanotiona reductasa y glutatión reductasa, , 2002

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Ciencias

Palabras clave: bioinformática estructural

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

F. Iribarne, S. Aguilera, M. Murphy, A. O. M. Stoppani and M. Paulino, november 29-30 2002, Montevideo-URUGUAY

Congreso

Molecular pharmacology studies on anti-trypanosomal active compounds. , 2002

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Química

Palabras clave: bioinformática estructural

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

M. Paulino*, F. Iribarne, A. García Otero, E. Alvareda, E. Cabrera, H. Cerecetto, R. Di Maio, S. Aguilera, M. Murphy, C. Gastellú Montevideo. 1-6 de Setiembre 2002

Congreso

Relaciones Estructura-Actividad y estudio del Mecanismo de Acción de Flavonoides con propiedades reguladoras de la sobrevida y muerte celular , 2002

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* XVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Montevideo.; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Química

Palabras clave: bioinformática estructural

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

Margot Paulino, Laura Lafon, Silvia Sepúlveda-Boza, Sara Aguilera-Morales y Federico Dajas. Montevideo. 1-6 de Setiembre 2002.

Congreso

Estudios de docking de compuestos nitrofuránicos en tripanotiona y glutatión reductasas: un análisis grafico. , 2002

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* XVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina.; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Química

Palabras clave: bioinformática estructural

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

Federico Iribarne, Ana García Otero, Hugo Cerecetto, Sara Aguilera, Miguel Murphy y Margot Paulino. Montevideo. 1-6 de Setiembre 2002.

Congreso

Estudios de anclaje de compuestos orgánicos adaptables a los sitios de la Tripanotona y Glutatión Reductasa, , 2002

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Uruguaya de biociencias

Palabras clave: bioinformática estructural

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

Federico Iribarne, Ana García Otero, Hugo Cerecetto, Mercedes González, Sara Aguilera, Miguel Murphy, Margot Paulino, 10-12 mayo 2002, Maldonado

Congreso

Química Computacional aplicada al estudio de pequeñas moléculas , 1997

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Brasil; *Nombre del evento:* Workshop sobre Modelado Molecular. Química Computacional aplicada al estudio de pequeñas moléculas; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Brasileira de Cristalografía

M. Paulino Zunini

Congreso

Diseño de Antichagásicos , 1996

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Conference Summing up 10 years of Bilateral Research Cooperation. ; *Nombre de la institución promotora:* SAREC

M. Paulino Zunini

Seminario

New targets for old drugs: synthesis, in vitro and in silico strategies applied to the discovering of new targets of potent specific tripanosomicidal o-naphtoquinones , 2014

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 30

Referencias adicionales: Italia; *Nombre del evento:* Department of Sciences, Roma Tre University Seminars; *Nombre de la institución promotora:* Department of Sciences, Roma Tre University

Palabras clave: reverse virtual screening; Chagas disease; o-quinones

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Seminario

Drug design methods available in the Structural Bioinformatic Center - DETEMA - Facultad de Química - UdelaR , 2012

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 8

Referencias adicionales: Italia; *Nombre del evento:* Meeting with graduate students of Roma 3 University; *Nombre de la institución promotora:* Roma 3 University

Palabras clave: drug design, bioinformatics

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, docking

Seminario

3.1.44 M. Paulino Zunini. "Estrategias que colaboran en el aumento del valor agregado de los productos naturales". Conferencista Invitada. Seminario sobre Hierbas Aromáticas, Medicinales y fitofármacos. Dirección de Programación Comercial. Ministerio de RREE. Montevideo, Uruguay, 2004. , 2004

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 30

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* 3.1.44 Seminario sobre Hierbas Aromáticas, Medicinales y fitofármacos. Dirección de Programación Comercial. Ministerio de RREE.;

Seminario

Docking and Molecular Dynamics studies at trypanothione reductase and glutathione reductase binding sites , 2001

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Canadá; *Nombre del evento:* Seminario; *Nombre de la institución promotora:* Department of Chemistry and Biochemistry, Laurentian University

M. Paulino Zunini

Seminario

Modelado Biomolecular de proteínas. Aplicaciones al diseño de inhibidores enzimáticos y de proteínas que unen ADN , 1999

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: España; *Nombre del evento:* Seminario; *Nombre de la institución promotora:* Univ. de Granada.España. Instituto de Biotecnología Lopez Neira

M. Paulino Zunini

Simposio

DEVELOPMENT OF NEW ANTICHAGASIC DRUGS: REVERSE VIRTUAL SCREENING AND MOLECULAR DYNAMICS OF ARILOXY-QUINONES Brenda Vera, Fabio Politicelli, Andrea Cavalli and Margot Paulino , 2017

Tipo de participación: Expositor oral, *Carga horaria:* 30

Referencias adicionales: Suiza; *Nombre del evento:* Structural Based Drug Design 2017;

Palabras clave: quinonas; chagas; Anclaje reverso

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Simposio

Study of polyphenols with antioxidant and anti-inflammatory activity and their correlation with Nuclear Factor Kappa B Paulino, M.a Fariña, E.a, Daghero, H.b, Bollati-Fogolín, M.b, Cantero, Jc,a, Mascayano, C.d , Vega-Tejido, M.a Olea, C.e, Moncada, M.e , 2017

Tipo de participación: Expositor oral, *Carga horaria:* 30

Referencias adicionales: Suiza; *Nombre del evento:* Structural Based Drug Design 2017;

Palabras clave: polifenoles; NFK-B; antiinflamatorios

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Simposio

"Bioinformatics in Ligand-Based and Structure-Based Drug Design", Theoretical and Practical Course and Workshop. February 22th - March 5th, 2010. , 2010

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 40

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Computational Modelling and Simulations of Biological Systems; *Nombre de la institución promotora:* Institut Pasteur de Montevideo, Montevideo, Uruguay

Palabras clave: Biomolecular Systems; Drug Design

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

Simposio

In silico characterization of cytosine analogues into nicotinic Acetylcholine Receptors 3D Models. Juan Andrés Abin-Carriquiry, Margot Paulino Zunini, Bruce K. Cassels, Federico Dajas. , 2009

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 32

Referencias adicionales: Chile; *Nombre del evento:* Workshop on Molecular Simulation of Bio and Nano Particles; *Nombre de la institución promotora:* Centro de Bioinformática y Simulación Molecular de la Universidad de Talca

Palabras clave: in silico; nanopartículas; nicotínicos

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

Simposio

3.1.36 M. Paulino Zunini. Structure Activity Relationships of Polyphenols in Natural Products. IIBCE. Montevideo. Uruguay. Conferencista Invitado. 2006 , 2006

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 20

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* 4º AFFASA Simposium. ; *Nombre de la institución promotora:* INSTITUTO DE INVESTIGACIONES BIOLÓGICAS CLEMENTE ESTABLE

Simposio

Consensus statement: session 9 . Discovery Research and New Therapeutic tools , 2005

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* SCIENTIFIC WORKING GROUP ON CHAGAS DISEASE ; *Nombre de la institución promotora:* TDR, WHO/PAHO, CDIA

L Flohe, R. Radi, M. Paulino, SCIENTIFIC WORKING GROUP ON CHAGAS DISEASE . Buenos Aires, 17-19 Abril 2005.

Simposio

3.1.49 Medicinal Chemistry – based approach and target-based drug research for the design and structure optimization of new compounds against Chagas disease , 2003

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 40

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* 3.1.49 Curso Regional Investigación y desarrollo de fármacos antoprotzoarios. AMSUD-Pasteur. Facultad de Ciencias y de Química- UdelaR. Montevideo. Uruguay. 2003; *Nombre de la institución promotora:* 3.1.49 Facultad de Ciencias y de Química- UdelaR.

Simposio

3.1.91 M. Paulino Zunini. Theoretical and experimental pharmacological approach to Chagas disease: specific action of new drugs against flavoenzymes of the parasitic related organisms and the mammalian hosts. Conferencista invitada Sweden-Argentina-Uruguay Symposium. Molecular. Biochemical and Immunological Approaches to parasitic diseases. Noviembre 1994. Montevideo. Uruguay. 1994 , 1994

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 40

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* 3.1.91 Sweden-Argentina-Uruguay Symposium. Molecular. Biochemical and Immunological Approaches to parasitic diseases.; *Nombre de la institución promotora:* SAREC

Simposio

3.1.99 M. Paulino Zunini. "Estudio de nuevas drogas contra T. cruzi". . Conferencista invitada. Simposio "Enfermedad de Chagas en el Uruguay". Asociacion Medica del Uruguaya. Montevideo Uruguay. 1993 , 1993

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 20

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Simposio de la Asociación Médica Uruguaya; *Nombre de la institución promotora:* Asociación Médica Uruguaya

Encuentro

Structural Bioinformatics applied to the Carotenoids research , 2014

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 40

Referencias adicionales: Costa Rica; *Nombre del evento:* IBERCAROT 2014; *Nombre de la institución promotora:* CYTED - Spain

Palabras clave: carotenoids; structural bioinformatics

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

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

Medicina Química

Encuentro

Presentación de resultados del proyecto CSIC-SP al sector Apícola uruguayo , 2008

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Conferencia; *Nombre de la institución promotora:* Fundación Zonamérica

Palabras clave: productos naturales; propóleos

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

Encuentro

Flavonoides con propiedades antioxidantes extraídos de propóleos y marcela , 2005

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Encuentro Regional de Ciencia, Tecnología y Sociedad, de Biotecnología de Productos/Recursos Naturales.; *Nombre de la institución promotora:* Ciencia Tecnología y Sociedad

M. Paulino Zunini, Montevideo

Encuentro

3.1.38 M Paulino Zunini. Medicina Química de Antioxidantes: Flavonoides con propiedades antioxidantes extraídos de propóleos y marcela. Conferencista invitado Uruguay; Encuentro Regional de Ciencia, Tecnología y Sociedad - Biotecnología de Productos/Recursos Naturales; Ciencia Tecnología y Sociedad . Montevideo. 2005 , 2005

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 40

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* 3.1.38 Encuentro Regional de Ciencia, Tecnología y Sociedad - Biotecnología de Productos/Recursos Naturales; Ciencia Tecnología y Sociedad ;

Encuentro

Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace , 2004

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Encuentro de evaluación de Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace; *Nombre de la institución promotora:* NASA USA - Facultad de Química /UdelaR

M. Paulino Zunini, Montevideo

Encuentro

3.1.48 Caracterización Estructural de Macromoléculas Biológicas de interés en la formulación de droga antiparasitarias , 2004

Tipo de participación: Moderador, *Carga horaria:* 30

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Reunión de coordinación CYTED;

Encuentro

Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace , 2003

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Estados Unidos; *Nombre del evento:* Encuentro de evaluación de Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace; *Nombre de la institución promotora:* NASA USA - Universidad de Alabama / Birmingham

M. Paulino Zunini

Encuentro

Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace , 2002

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Costa Rica; *Nombre del evento:* Encuentro de evaluación de Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace; *Nombre de la institución promotora:* NASA USA - EARTH Costa Rica

M. Paulino Zunini

Encuentro

3.1.68 M. Paulino Zunini. "Cuatro modelos de biomoléculas resueltos por Química Computacional: Tripanotona reductasa y Partícula nucleosomal de T. cruzi, EgDF1 y Malato deshidrogenasa de E granulosus". Conferencista invitada. Encuentro de Investigadores PEDECIBA Química. Montevideo, Uruguay. 1998 , 1998

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 30

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Encuentro de Investigadores PEDECIBA Química. Montevideo; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA Química

Indicadores de producción

| | |
|---------------------------------------------------------------------|------------|
| <i>Producción bibliográfica</i> | 189 |
| <i>Artículos publicados en revistas científicas</i> | 58 |
| Completo (Arbitrada) | 57 |
| Completo (No Arbitrada) | 1 |
| <i>Artículos aceptados para publicación en revistas científicas</i> | 1 |
| Completo (Arbitrada) | 1 |
| <i>Trabajos en eventos</i> | 118 |
| Completo (Arbitrada) | 5 |
| Resumen (Arbitrada) | 101 |
| Resumen (No Arbitrada) | 10 |
| Resumen expandido (Arbitrada) | 1 |
| Resumen expandido (No Arbitrada) | 1 |
| <i>Libros y capítulos de libros publicados</i> | 5 |
| Capítulo de libro publicado | 4 |
| Libro compilado | 1 |
| <i>Textos en periódicos</i> | 4 |
| Revista | 4 |
| <i>Documentos de trabajo</i> | 3 |
| Completo | 3 |
| <i>Producción técnica</i> | 0 |
| <i>Productos tecnológicos</i> | 0 |
| <i>Procesos o técnicas</i> | 0 |
| <i>Trabajos técnicos</i> | 0 |
| <i>Otros tipos</i> | 0 |
| <i>Evaluaciones</i> | 10 |
| Evaluación de Proyectos | 4 |
| Evaluación de Eventos | 1 |
| Evaluación de Publicaciones | 5 |
| <i>Formación de RRHH</i> | 23 |
| <i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</i> | 18 |
| Tesis de maestría | 4 |
| Tesis de doctorado | 5 |
| Tesis/Monografía de grado | 8 |
| Iniciación a la investigación | 1 |
| <i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha</i> | 5 |
| Tesis de maestría | 3 |
| Tesis de doctorado | 1 |
| Tesis/Monografía de grado | 1 |

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores