



# Curriculum Vitae

## Oscar Néstor VENTURA PÉREZ



Actualizado: 07/09/2016

Publicado: 20/07/2017

**Sistema Nacional de Investigadores**

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas

Categorización actual: Nivel III

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

## Datos generales

### Información de contacto

E-mail: onv@fq.edu.uy

Teléfono: +59899501368

Dirección: CCBG, DETEMA, Facultad de Química, UdeLaR, Avda. Gral. Flores 2124, CC1157, 11800 Montevideo, Uruguay

URL: <http://ccbg.fq.edu.uy>

### Institución principal

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

### Dirección institucional

Dirección: Facultad de Química - UDeLaR / CCBG DETEMA / Avenida General Flores 2124 / cc 1157 / 11800 / Montevideo / Uruguay

Teléfono: (+598) 29248396

Fax: 29241906

E-mail/Web: [onv@fq.edu.uy](mailto:onv@fq.edu.uy) / <http://ccbg.fq.edu.uy>

## Formación

### Formación concluida

#### Formación académica/Titulación

##### Posgrado

1983 - 1984

Doctorado

Doctorado en Química

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

Título: Estudio químico cuántico de la importancia de los complejos de enlace de hidrógeno en la reactividad química

Tutor/es: Ramón M. Sosa

Obtención del título: 1993

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

1981 - 1982

Maestría

Magister en Química

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

Título: Estudios sobre bioquímica cuántica. La teoría electrónica del cáncer y aspectos relacionados

Tutor/es: Ramón M. Sosa

Obtención del título: 1982

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

##### Grado

1975 - 1981

Grado

Bachiller en Química

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

*Obtención del título:* 1981

*Palabras clave:* Química

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

## Formación complementaria

### Postdoctorado

1984 - 1985

Universidad Autónoma de Barcelona , España

*Becario de:* Rotary Foundation (Rotary International) , Estados Unidos

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

### Cursos corta duración

1981 - 1981

Teoremas Hiperviriales

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas , Argentina

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Física Molecular

1981 - 1981

Curso Avanzado de Química Teórica

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas , Argentina

1981 - 1981

Metodología Hartree-Fock

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas , Argentina

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Física Molecular

## Construcción institucional

hemos podido concretar el viejo sueño de desarrollar un cluster computacional propio construyéndolo con sucesivas adiciones a partir de recursos provenientes de diversos proyectos. El cluster comenzó a instalarse en 2008 y tuvo una primera etapa hasta 2011 en que contábamos con relativamente baja capacidad computacional. Este fenómeno fue revertido en este período y en este momento el equipo cuenta con varios servidores independientes de las marcas HP y Dell, que funcionan en paralelo gracias a una conexión de internet propia de alta velocidad. Actualmente el cluster cuenta con 22 nodos, que en conjunto suman 352 cores.

## Idiomas

Alemán

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

Español

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

Francés

Entiende (Bien) / Lee (Bien)

Inglés

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

## Áreas de actuación

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente / Ciencias Medioambientales / Riles, Efluentes, Tratamientos de agua

## Actuación Profesional

## Cargos desempeñados actualmente

Desde: 01/1987

Area Química, Investigador Grado 5. , Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas , Uruguay

Desde: 01/1977

Profesor catedrático efectivo , (40 horas semanales / Dedicación total) , Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay

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

### Vínculos con la institución

01/1987 - Actual, *Vínculo:* Area Química, Investigador Grado 5., )

### Actividades

01/1987 - Actual

Líneas de Investigación

01/2006 - 12/2009

Gestión Académica , Facultad de Química

Comisión de Ingreso de Investigadores

01/1988 - 12/1991

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Area Química

Caracterización fisicoquímica de plásticos polivinílicos y polímeros derivados de aldehidos de importancia química y bioquímica

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

### Vínculos con la institución

01/1977 - Actual, *Vínculo:* Profesor catedrático efectivo, (40 horas semanales / Dedicación total)

01/1989 - 12/1997, *Vínculo:* Profesor agregado, (40 horas semanales / Dedicación total)

01/1986 - 12/1989, *Vínculo:* Profesor agregado, (40 horas semanales)

01/1985 - 12/1986, *Vínculo:* Asistente interino, (20 horas semanales)

### Actividades

02/1999 - 03/2002

Dirección y Administración , Cátedra de Química Cuántica

Director de unidad

01/1991 - 05/1992

Dirección y Administración , Cátedra de Química Cuántica

Director de unidad

01/1990 - 05/1992

Dirección y Administración

Director del Instituto de Química

07/2004 - 11/2004

Docencia , Grado

Fisicoquímica Molecular Básica , Química

03/2004 - 07/2004

Docencia , Grado

Introducción a la Bioinformática , Química

07/2003 - 11/2003

Docencia , Grado

Mecánica Cuántica , Química

07/2003 - 11/2003

Docencia , Grado

Química Computacional , Química

03/2002 - 07/2002

Docencia , Grado

Fisicoquímica Molecular Básica , Química

07/2000 - 07/2000

Docencia , Grado

Modelado Molecular , Química

04/1999 - 07/1999

Docencia , Grado

Modelado Molecular , Química

01/1999 - 06/1999

Docencia , Grado

Química Cuántica , Química

11/1998 - 01/1999

Docencia , Grado

Química Cuántica , Química

04/1998 - 07/1998

Docencia , Grado

Modelado Molecular , Química

12/2007 - 12/2011

Extensión , Facultad de Química , CCBG, DETEMA

Divulgación científica en contaminación ambiental

01/2005 - 12/2005

Capacitación/Entrenamientos dictados

BADENES, María Paula. Estudios sobre reacciones químicas de dioxinas. Estudiante de Postdoctorado enviada por Carlos J. Cobos del INIFTA para trabajar durante un año en Montevideo

01/1998 - 12/1998

Capacitación/Entrenamientos dictados

JORGE, Nelly (Universidad Nacional del Nordeste, Argentina). Estructura y calor de formación de biperóxidos cíclicos. Orientación de la docente para la realización de cálculos ab initio y de funcionales de la densidad

01/1996 - 12/1996

Capacitación/Entrenamientos dictados

KIENINGER, Martina. Estudios sobre nucleasas químicas. Deutsche Krebsforschungszentrum, Alexander Von Humboldt Stiftung. (Tutor)

01/1996 - 12/1996

Capacitación/Entrenamientos dictados

01/1996 - 12/1996

Capacitación/Entrenamientos dictados

01/1999 - Actual

Otra actividad técnico-científica relevante

Referee Científico para el International Journal of Quantum Chemistry, EEUU

01/1996 - Actual

Otra actividad técnico-científica relevante

Referee científico para el Journal of Physical Chemistry

01/1995 - Actual

Otra actividad técnico-científica relevante

Referee científico para Theochem

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores

01/2004 - 12/2004

Otra actividad técnico-científica relevante

Referee Científico para Cell and Molecular Biology, EEUU

01/2000 - 12/2000

Otra actividad técnico-científica relevante

Referee Científico para Anales de la Asociación Química Argentina

01/1997 - 12/1997

Otra actividad técnico-científica relevante

Referee científico para el Advances in Quantum Chemistry

04/1998 - Actual

Gestión Académica , Consejo de la Facultad

Consejero Titular por el Orden Docente

01/2000 - 12/2002

Gestión Académica

Delegado área básica - CSIC, UDELAR

01/1998 - 12/2002

Gestión Académica , Claustro de la Facultad

Claustrista

01/1998 - 12/1999

Gestión Académica

Comisión Interfacultades de Ingeniería Química

01/1998 - 01/1999

Gestión Académica

Comisión de Estructura Docente

01/1998 - 12/1998

Gestión Académica

Comisión de Investigación Científica

01/1994 - 01/1995

Gestión Académica , Claustro de la Facultad

Claustrista

12/1990 - 05/1992

Gestión Académica

Integrante Comisión de Instituto

12/1990 - 05/1992

Gestión Académica , Consejo de la Facultad

Consejero Suplente

01/1991 - 12/1991

Gestión Académica

Comisión de Equipamiento Informático

01/1989 - 12/1990

Gestión Académica

Comisión Técnica de Magister en Química y Doctorado

01/1989 - 01/1990

Gestión Académica

Comisión de Redacción de Revista Científica

01/1988 - 01/1990

Gestión Académica

Comisión Central de Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores

01/1988 - 12/1989

Gestión Académica

Comisión de Reestructura de Facultad de Química

04/1985 - 04/1989

Gestión Académica , Consejo de la Facultad

Consejero Suplente

01/1986 - 01/1987

Gestión Académica

Cursos y Asuntos Curriculares

01/1985 - 01/1987

Gestión Académica , Claustro de la Facultad

Claustrista

01/1985 - 01/1987

Gestión Académica

Comisión de Investigación Científica

04/2011 - 03/2015

## Sistema Nacional de Investigadores

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , CCBG, DETEMA

Nanotransductores en procesos celulares de señales redox efectuadas por especies reactivas de oxígeno. Óxido-reducción de residuos con azufre y selenio en proteínas, inhibidores y biomiméticos involucrados en los procesos de regulación redox , Coordinador o Responsable

01/2005 - 01/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Cátedra de Química Cuántica

Formación de dioxinas en la combustión : visión micro, meso y macro , Coordinador o Responsable

01/2004 - 12/2004

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Cátedra de Química Cuántica

Structural bioinformatics: obtaining 3D models of short bioactive peptides from multiple sequences using Feedback Restrained Molecular Dynamics

01/2000 - 12/2002

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Cátedra de Química Cuántica

Estudio computacional de la activación de oxígeno molecular en complejos mono y binucleares de Fe y Cu con importancia biológica

01/1997 - 12/1999

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Cátedra de Química Cuántica

Estudio computacional de la Química Atmosférica de los radicales CF<sub>3</sub>O: una contribución a las transformaciones de los hidrofluorocarbonos en la atmósfera

01/1995 - 12/1997

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Cátedra de Química Cuántica

Study of intramolecular proton transfer in excited states of hydrogen bonded molecules

01/1993 - 12/1996

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Cátedra de Química Cuántica

Construcción de memorias moleculares multifotónicas: estudio de los procesos básicos

01/1993 - 12/1994

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Cátedra de Química Cuántica

Estudio teórico de reacciones de descomposición de ozono en la atmósfera

01/1990 - 12/1994

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Cátedra de Química Cuántica

Static and dynamic aspects of the solvent influence on reactions involving transformation of the aldehyde group with applications to enzymatic processes

01/1991 - 12/1993

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Cátedra de Química Cuántica

Estudio computacional de complejos de enlace de hidrógeno neutros en estados excitados e ionizados

01/1989 - 12/1992

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Cátedra de Química Cuántica

Ab initio and laser-spectroscopical study of hydrogen- bonded clusters in free jets

01/1989 - 12/1991

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Cátedra de Química Cuántica

Theoretical and experimental pharmacological approach to Chagas disease: specific action o new drugs against Tripanothione Reductase with low Glutathione Reductase inactivation-related toxicity

01/1982 - 01/1983

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Cátedra de Química Cuántica

Estudio Teórico sobre Catálisis Heterogénea: Mecanismos de Reacciones Químicas Importantes para la Obtención de Energía a Bajo Costo

## Universidad de la República , Facultad de Humanidades y Ciencias de la Educación - UDeLaR , Uruguay

### Vínculos con la institución

01/1982 - 01/1984, *Vínculo:* Profesor adjunto interino, (40 horas semanales)

01/1981 - 01/1982, *Vínculo:* Asistente, (40 horas semanales)

01/1980 - 01/1981, *Vínculo:* Ayudante, (20 horas semanales)

01/1976 - 01/1979, *Vínculo:* Ayudante Grado 1, (20 horas semanales)

01/1981 - 01/1985, *Vínculo:* Asistente, (20 horas semanales)

01/1984 - 01/1986, *Vínculo:* Profesor agregado, (40 horas semanales)

### Proyectos

2005 - Actual

*Título:* Computación paralela para aplicaciones en bioinformática, *Descripción:* Proyecto aprobado por CSIC, colaboración entre las Facultades de Ingeniería y Química

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 2(Especialización),

*Equipo:* Cancela, Héctor(Responsable)

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

1993 - Actual

*Título:* Construcción de memorias moleculares multifotónicas: estudio de los procesos básicos, *Descripción:* Proyecto financiado por el Instituto de Cooperación Iberoamericana, US\$ 20.000. Financiadore(s): Universidad de La República - UDELAR (Cooperación); Universitat Autònoma de Girona - U.A.G. (Cooperación); Instituto de Cooperación Iberoamericana - ICI (Apoyo financiero)

*Tipo:* Desarrollo

*Alumnos:*

*Equipo:* Duran i Portas, Miquel(Integrante)

1991 - Actual

*Título:* Estudio computacional de complejos de enlace de hidrógeno neutros en estados excitados e ionizados,

*Tipo:* Desarrollo

*Alumnos:*

*Equipo:* Diercksen, Geerd H.F. (Integrante)

2000 - Actual

*Título:* Estudio computacional de la activación de oxígeno molecular en complejos mono y binucleares de Fe y Cu con importancia biológica, *Descripción:* Proyecto financiado por CSIC, US\$ 20.000

*Tipo:* Desarrollo

*Alumnos:*

*Equipo:* Kieninger, Martina(Responsable)

1997 - Actual

*Título:* Estudio computacional de la Química Atmosférica de los radicales CF<sub>3</sub>O: una contribución a las transformaciones de los hidrofluorocarbonos en la atmósfera,

*Tipo:* Desarrollo

*Alumnos:*

*Equipo:* Segovia, Marc Eduardo(Responsable)

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

1993 - Actual

*Título:* Estudio teórico de reacciones de descomposición de ozono en la atmósfera, *Descripción:* Proyecto en cooperación con Brasil y Polonia. Parte uruguaya financiada por la Comisión Sectorial de Investigación Científica, UDELAR, US\$ 15.000. Financiadore(s): Universidad de La República - UDELAR (Cooperación); Universidade de São Paulo - USP; Universidad de Wroclaw - UW

*Tipo:* Desarrollo

*Alumnos:*

*Equipo:* Latajka, Zdzislaw (Integrante); Canuto, Sylvio(Integrante)

1982 - Actual

*Título:* Estudio Teórico sobre Catálisis Heterogénea: Mecanismos de Reacciones Químicas Importantes para la Obtención de Energía a Bajo Costo,

*Tipo:* Desarrollo

*Alumnos:*

*Equipo:* Sosa, Ramón M.(Integrante)

1990 - Actual

*Título:* Static and dynamic aspects of the solvent influence on reactions involving transformation of the aldehyde group with applications to enzymatic processes,

*Tipo:* Desarrollo

*Alumnos:*

*Equipo:* Tomasi, Jacopo(Integrante)

2004 - Actual

*Título:* Structural bioinformatics: obtaining 3D models of short bioactive peptides from multiple sequences using Feedback Restrained Molecular Dynamics,

*Tipo:* Desarrollo

*Alumnos:*

*Equipo:* Kieninger, Martina(Responsable)

*Financiadores:* Institución del exterior / Alexander von Humboldt-Stiftung / Apoyo financiero

1995 - Actual

*Título:* Study of intramolecular proton transfer in excited states of hydrogen bonded molecules, *Descripción:* Proyecto en cooperación con Alemania, España y Polonia, financiado por la Comunidad Económica Europea (US\$ 480.000) y el BID (US\$ 190.000). Financiadore(s): Universidad de La República - UDELAR (Cooperación); Max Planck Institut Fur Physik Und Astrophysik Garching - MPA (Cooperación); Universitat Autonoma de Girona - U.A.G. (Cooperación); Universidad de Poznan - UP (Cooperación); Universidad de Wroclaw - UW (Cooperación); Universidad de Torun - UT (Cooperación); Comisión de Las Comunidades Europeas - C.C.E.E. (Apoyo financiero); Banco Interamericano de Desarrollo - BID (Apoyo financiero)

*Tipo:* Desarrollo

*Alumnos:*

*Equipo:* Diercksen, Geerd H.F. (Integrante); Karwowski, Jacek(Integrante); Bancewicz, Malgorzata (Integrante); Duran i Portas, Miquel(Integrante); Sosa, Ramón M.(Integrante); Latajka, Zdzislaw (Integrante)

1989 - Actual

*Título:* Theoretical and experimental pharmacological approach to Chagas disease: specific action o new drugs against Tripanothione Reductase with low Glutathione Reductase inactivation-related toxicity,

*Tipo:* Desarrollo

*Alumnos:*

*Equipo:* Paulino, Margot(Integrante)

## Sistema Nacional de Investigadores

## Sistema Nacional de Investigadores



1988 - 1991

*Título:* Caracterización fisicoquímica de plásticos polivinílicos y polímeros derivados de aldehídos de importancia química y bioquímica, *Descripción:* Dotación total US\$ 34.903. Integrantes: Oscar Néstor Ventura Pérez (Responsable)

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 4(Pregrado), 1(Maestría/Magister),

1989 - 1991

*Título:* Theoretical studies of boron anionic heterocycles derived from hydroxamic acids,

*Tipo:* Desarrollo

*Alumnos:*

*Equipo:* Dannenberg, J.J.(Integrante)

1989 - 1992

*Título:* Ab initio and laser-spectroscopical study of hydrogen-bonded clusters in free jets, *Descripción:* Financiador(es): Universidad de La República - UDELAR (Cooperación); Universidad Autónoma de Barcelona - U.A.B. (Cooperación); Universität Heidelberg (Ruprecht-Karls) - R.K.U.H.\* (Cooperación); Max Planck Institut Fur Physik Und Astrophysik Garching - MPA (Cooperación); Comisión de Las Comunidades Europeas - C.C.E.E. (Apoyo financiero).

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 2(Maestría/Magister),

*Equipo:* Diercksen, Geerd H.F. (Integrante); Bertran, Juan (Integrante)

2005 - 2010

*Título:* Formación de dioxinas en la combustión : visión micro, meso y macro, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable,

*Tipo:* Desarrollo

*Alumnos:* 1(Doctorado)

*Equipo:* Segovia, Marc Eduardo(Responsable)

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

2011 - 2015

*Título:* Nanotransductores en procesos celulares de señales redox efectuadas por especies reactivas de oxígeno. Óxido-reducción de residuos con azufre y selenio en proteínas, inhibidores y biomiméticos involucrados en los procesos de regulación redox, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* La propuesta consiste en apuntalar diversas líneas de investigación convergentes en un programa de enzimología computacional. Si bien el programa se plantea para financiamiento a 48 meses, las provisiones de equipamiento, formación de capital computacional y recursos humanos, dentro de una temática novedosa y relativamente poco desarrollada, apunta a un programa a largo plazo (10-15 años) donde naturalmente las líneas de investigación irán mutando de acuerdo al conocimiento generado. El centro temático de la propuesta es el funcionamiento de ROS, específicamente H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> como mensajero secundario que afecta la actividad y conformación de enzimas involucradas en la reparación de oxidación de proteínas. Las enzimas a estudiarse funcionan todas por oxidación de azufre a disulfuro, sulfóxidos, sulfenos, sulfinos, sulfonas (y las especies equivalentes para selenio). No todas las enzimas involucradas en el proceso de oxidación de tioles van a ser investigadas en este programa, sino que se eligieron algunas en particular, que presentan características interesantes y novedosas. Desde el punto de vista temático, el interés de este proyecto descansa en dos aspectos. Por un lado, el hecho de que para las enzimas que proponemos estudiar, los mecanismos de acción detallados, así como las variables fisicoquímicas que los afectan no son completamente conocidas a nivel molecular. Por otro lado, el estudio de inhibidores y biomiméticos nos permite una aproximación biotecnológica hacia la fabricación de enzimas artificiales para actuar, por ejemplo, como antioxidantes sintéticos o reaccionar a las señales de aumento de concentración de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. Las siguientes son las líneas de investigación. a) Desarrollo de software de bioinformática estructural. b) Investigación de reacciones químicas en medio acuoso a distintos pH, para determinar estructuras, interacciones, espectros y propiedades energéticas de las reacciones orgánicas que están en el centro del proceso catalítico, pero realizadas sobre modelos en solución acuosa. c) Investigación de reactivos para reconocimiento de sulfinos y sulfonas, para intentar obtener compuestos que reaccionen más fácilmente con estos que con sulfenos, para usar como reactivos de reconocimiento específico. d) Investigación sobre biomiméticos, moléculas simples (complejos metálicos o macrociclos orgánicos) que mimeticen la acción de la Gpx. e) Investigaciones sobre complejos metálicos de Cys, HCys y Sec, para entender el efecto catalítico de los iones Zn<sup>2+</sup> y Cu<sup>2+</sup> en interacción con los tioles, y cómo modifica esta interacción la oxidabilidad de los tioles (o selenoles) unidos a él. f) Investigaciones sobre PTP1B (fosforilación y oxidación por H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>) para entender su inactivación reversible e irreversible, en particular en sus reacciones con H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, investigando su estabilidad en el tiempo mediante cálculos QM/MM de dinámica molecular. g) Investigaciones sobre el complejo peroxiredoxina/sulfiredoxina para comprender la importancia de la transformación sulfénico/sulfínico como señal celular y de qué manera se evita la inactivación irreversible. h) Investigaciones sobre Betaína-homocisteína S-metiltransferasa y Methiona-R-sulfóxido reductasas para determinar las estructuras y la energética del mecanismo de transferencia de metilo a la HCys, la oxidación de Met a MetSo y la reducción enantiomérica de la misma, considerando la diferencia de eficiencia entre Cys y Sec. i) Investigaciones sobre mutación de Cys con HCys y Sec.

*Tipo:* Investigación

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

*Equipo:* SAENZ-MENDEZ, Patricia(Integrante); Fiorentina Bottinelli(Integrante); Eduardo Bermúdez(Integrante); Martina Kieninger(Integrante); Mauricio Vega(Integrante); Kenneth Irving(Integrante); Aline Katz(Integrante); Marc Segovia(Integrante)

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

## Producción científica/tecnológica

Especializado en la aplicación de métodos de la Química Computacional para la solución de problemas químicos y bioquímicos. Desde 1977, en que inicié mis actividades de investigación, empleé prácticamente todos los métodos desarrollados para cálculos de geometrías, energías, espectroscopía y caminos de reacción, en forma estática y dinámica. Las contribuciones más importantes que he realizado para resolver problemas en las áreas mencionadas son las siguientes: (a) determinación de caminos de reacción para transformaciones químicas donde el solvente participa activamente, tales como la isomerización de los ácidos hidroxámicos o las reacciones de enolización y aldólicas; (b) la producción de información termoquímica para compuestos pequeños pero de estructura electrónica complicada, como por ejemplo los óxidos de flúor, los radicales ROO. y moléculas de azufre tales como el sulfino, en muchos casos proveyendo correcciones a determinaciones experimentales no demasiado precisas; (c) la investigación de sustancias orgánicas halogenadas tanto como contaminantes como usadas en reemplazo de contaminantes, por ejemplo los hidrocarburos perfluorados, triflorometanol, bencenos y fenoles clorados, y policlorobenzofuranos; (d) estudio de reacciones enzimáticas y propuesta de nuevos mecanismos de acción, por ejemplo para la aldosa reductasa, apoyando y retroalimentando a los estudios experimentales; (e) estudios sobre complejos de metales de transición (Fe, Rh, Re, Tc) y sobre interacción entre moléculas orgánicas y nanopartículas (por ej. el coating de partículas de oro). En el presente, mis investigaciones apuntan a cuatro grandes programas, que tienen puntos en común y dentro de los cuales se inscriben mis proyectos de investigación. El primero (ECOCOP) se centra en emplear las herramientas de la química teórica para resolver problemas en química atmosférica (contaminantes orgánicos persistentes) y en general problemas de contaminación (por ejemplo cloroorgánicos). El segundo programa (BIOCAB) apunta al estudio de mecanismos de reacción enzimáticos, especialmente metaloenzimas, como por ejemplo las oxigenasas y peroxidasas, pero también otras como la aldol reductasa o las fosfatasas humanas. Un tercer (QUICOMAD) se centra en el estudio de la química de la madera, particularmente procesos de pulpado como el Kraft y de blanqueo (con ClO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, peroxocarbónico, etc). Finalmente, el programa BASINMOL se centra en estudios básicos de problemas termoquímicos y su elaboración mesoscópica para realizar cálculos de ingeniería química molecular, en particular en combustión y química atmosférica. El producto de estos estudios es comunicado periódicamente a la comunidad científica. A Agosto 2015, he producido más de 115 artículos científicos y he hecho más de 150 comunicaciones a congresos, conferencias invitadas y minicursillos, en unos 30 países de las Américas, Europa y África. De acuerdo al análisis de citación de la Thomson Web of Science (WOS), cada uno de mis 101 artículos presentes en la base de datos ha sido empleado por otros autores (citado) un promedio de 12.89 veces, he tenido un promedio de 42 citas por año (con un total de 1.302 citas) y un h-index de 21. En Scopus, más completo que Thomson, hay presentes 108 artículos, 1.450 citas (promedio 13.43 citas por artículo) el h-index es 22 y el índice i10 es 47.

## Sistema Nacional de Investigadores

### Producción bibliográfica

#### Artículos publicados

#### Arbitrados

Completo

GIBILISCO, RG; KIENINGER, MARTINA; VENTURA, O.N.; TERUEL, MA

Atmospheric reactivity of HC [triple bond, length as m-dash] CCH 2 OH (2-propyn-1-ol) toward OH radicals: experimental determination and theoretical comparison with its alkyne analogue. RSC Advances, v.: 5 129, p.: 106668 - 106679, 2015

Palabras clave: Atmospheric chemistry; Chemical kinetics; Theoretical chemistry

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

Medio de divulgación: Papel ; Lugar de publicación: London ; ISSN: 20462069 ; DOI: 10.1039/C5RA19432F

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/ra/c5ra19432f#!divAbstract>

The rate coefficient for the reaction of propargyl alcohol (2-propyn-1-ol, 2P1OL) with OH radicals has been determined using gas chromatography with a flame ionization detector (GC/FID) at 298 K and atmospheric pressure. The experimental value obtained by the relative method using methyl methacrylate and butyl acrylate as references was  $(2.05 \pm 0.30) \times 10^{-11}$  cm<sup>3</sup> per molecule per s. The present value was compared with previous determinations and a theoretical study of the reaction was performed in order to explain the differences in reactivity of the alcohol with

that of the corresponding alkyne (propyne, P). A full discussion of the addition and abstraction mechanisms was developed for 2P1OL at the density functional and ab initio composite model levels. It was found that addition is much faster than abstraction for propyne but occurs at approximately the same rate for 2P1OL. In this last case, however, abstraction of hydrogen from the C1 carbon leads to a complex which can react further to yield addition products. Thermodynamic and kinetic data calculated for these reactions suggest that the products would be the 1,2- and 1,3-propanediol radicals. These products would react further with O<sub>2</sub>, in the case where it is present in the reaction mixture.



SCOPUS



Completo

E. BERMUDEZ; VENTURA, O.N.; ERIKSSON, LA; SAENZ.MÉNDEZ, P

Improved homology model of cyclohexanone monooxygenase from *Acinetobacter calcoaceticus* based on multiple templates.

Computational Biology and Chemistry, v.: 49, p.: 14 - 22, 2014

*Palabras clave:* enzimología computacional

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 14769271

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1476927114000140>

A new homology model of cyclohexanone monooxygenase (CHMO) from *Acinetobacter calcoaceticus* is derived based on multiple templates, and in particular the crystal structure of CHMO from *Rhodococcus* sp. The derived model was fully evaluated, showing that the quality of the new structure was improved over previous models. Critically, the nicotinamide cofactor is included in the model for the first time. Analysis of several molecular dynamics snapshots of intermediates in the enzymatic mechanism led to a description of key residues for cofactor binding and intermediate stabilization during the reaction, in particular Arg327 and the well known conserved motif (FxGxxxHxxxW) in Baeyer-Villiger monooxygenases, in excellent agreement with known experimental and computational data.



SCOPUS

Completo

VEGA-TEIJIDO, MA; MALUF, SEC; BONTURI, CR; VENTURA, O.N.; AMABRANO, JR

Theoretical insight into the mechanism for the inhibition of the cysteine protease cathepsin B by 1, 2, 4-thiadiazole derivatives. Journal of Molecular Modeling, v.: 20 6, p.: 1 - 14, 2014

*Palabras clave:* Proteínas, DFT, mecanismo de reacción

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 09485023 ; DOI: 10.1007/s00894-014-2254-0

<http://link.springer.com/article/10.1007/s00894-014-2254-0>

Several cellular disorders have been related to the overexpression of the cysteine protease cathepsin B (CatB), such as rheumatic arthritis, muscular dystrophy, osteoporosis, Alzheimer's disease, and tumor metastasis. Therefore, inhibiting CatB may be a way to control unregulated cellular functions and prevent tissue malformations. The inhibitory action of 1,2,4-thiadiazole (TDZ) derivatives has been associated in the literature with their ability to form disulfide bridges with the catalytic cysteine of CatB. In this work, we present molecular modeling and docking studies of a series of eight 1,2,4-thiadiazole compounds. Substitutions at two positions (3 and 5) on the 1,2,4-thiadiazole ring were analyzed, and the docking scores were correlated to experimental data. A correlation was found with the sequence of scores of four related compounds with different substituents at position 5. No correlation was observed for changes at position 3. In addition, quantum chemistry calculations were performed on smaller molecular models to study the mechanism of inhibition of TDZ at the active site of CatB. All possible protonation states of the ligand and the active site residues were assessed. The tautomeric form in which the proton is located on N2 was identified as the species that has the structural and energetic characteristics that would allow the ring opening of 1,2,4-thiadiazole.

Sistema Nacional de Investigadores



Completo

SEGOVIA; ME; IRVING, K; VENTURA, O.N.

Density functional and chemical model study of the competition between methyl and hydrogen scission of propane and  $\beta$ -scission of the propyl radical. Theoretical Chemistry Accounts (E), v.: 132 1, p.: 1 - 18, 2013

*Palabras clave:* kinetics

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 14322234

In this work, we study the competence between the reactions of hydrogen and methyl scission during thermal cracking and combustion of propane, the emergence of the two isomers of the propyl radical, n-propyl and i-propyl, and their subsequent  $\beta$ -scission reaction to ethene and methyl radical. The purpose of the study was to analyze the accuracy of density functional (DFT) methods as applied on this relatively well-known subset of the reactions implied in the production of propylene oxide from propane and propene. ...

Completo

KATZ, A; SAENZ.MÉNDEZ, P; COUSIDO-SIAH, A.; PODJARNY, AD; VENTURA, O.N.

EXPERIMENTAL AND THEORETICAL STUDY OF THE MOVEMENT OF THE WPD FLEXIBLE LOOP OF HUMAN PROTEIN TYROSINE PHOSPHATASE PTP1B IN COMPLEX WITH HALIDE IONS. *Biophysical Reviews and Letters*, v.: 3 3, p.: 197 - 217, 2012*Palabras clave:* *enzimología computacional**Areas del conocimiento:* *Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional**Medio de divulgación:* *Papel* ; ISSN: 17930480*Protein tyrosine phosphorylation is a post-translational modification mechanism, crucial for the regulation of nearly all aspects of cell life. This dynamic, reversible process is regulated by the balanced opposing activity of protein tyrosine kinases and protein tyrosine phosphatases. In particular, the protein tyrosine phosphatase 1B (PTP1B) is implicated in the regulation of the insulin-receptor activity, leptin-stimulated signal transduction pathways and other clinically relevant metabolic routes, and it has been found overexpressed or ...*

Completo

KIENINGER, MARTINA; VENTURA, O.N.

Calculations of the infrared and Raman spectra of simple thiols and thiol-water complexes. *International Journal of Quantum Chemistry*, v.: 111 7-8, p.: 1843 - 1857, 2011*Palabras clave:* *Raman Spectroscopy**Areas del conocimiento:* *Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional**Medio de divulgación:* *Papel* ; ISSN: 00207608 ; DOI: 10.1002/qua.22890<http://onlinelibrary.wiley.com.proxy.timbo.org.uy:443/doi/10.1002/qua.22890/abstract;jsessionid=4B10A0CC3E98B8DB1E828A645642CB.D6.d03t03?systemMessage=Wiley+Online+Library+will+be+disrupted+5+Nov+from+10-12+GMT+for+monthly+maintenance>

The frequencies and intensities of infrared and Raman spectra of H<sub>2</sub>S, CH<sub>3</sub>SH, CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>SH, and CH<sub>2</sub>[DOUBLE BOND]CHCH<sub>2</sub>SH, isolated and complexed with one water molecule acting as a proton acceptor were calculated at the ab initio and density functional level. Hartree-Fock, MP2 and CCSD(T) methods were used both for the geometry optimization and spectra calculations at the molecular orbital level. The B3LYP, PBE0, and M06 exchange-correlation potentials were employed to calculate the same properties at the DFT level. Both Pople basis sets, 6-31+G(d) and 6-311++G(3df,2pd), and Dunning basis sets, aug-cc-pVTZ and aug-cc-pVQZ, were used. SH and CS frequency shifts upon water complexation were studied, and a discussion is performed on the expected relation between the CH and CS Raman activities, in view of their usefulness for studies in protein chemistry. Scaling factors for the vibrational frequencies were obtained for all the combination of methods and basis sets, and shown to be completely similar to the ones present in the literature when available. Scaling factors for the M06 method are presented for the first time with these basis sets. © 2010 Wiley Periodicals, Inc. *Int J Quantum Chem*, 2010

Completo

VENTURA, O.N.; SAENZ-MENDEZ, P; BOTTINELLI, F.

Computational study on the partial dechlorination of the pesticide chloropicrin by sulfur species. *Theoretical Chemistry accounts (Print)*, v.: 130 3, 2011*Palabras clave:* *Chloropicrin**Areas del conocimiento:* *Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional**Medio de divulgación:* *Papel* ; ISSN: 1432881X ; DOI: 10.1007/s00214-011-1057-y<http://www.springerlink.com/content/77127807p7463027/>

Density functional and MP2 calculations with extended basis sets were performed on the species participating in both the previously suggested and a newly proposed mechanisms of partial dechlorination of chloropicrin by simple sulfur species, both in gas phase and in a simulated water environment. Thermochemistry of both mechanisms in the gas phase was also studied using the chemical models G3 and G4. It is shown that the previously proposed reductive dehalogenation is not thermodynamically feasible at room temperature, as it should be according to the experimental evidence. Although inclusion of the solvent improves the results with respect to gas phase, the thermodynamics of the proposed mechanism by Zheng et al. is still unfavorable for obtaining the experimental products. An alternative mechanism is then proposed, involving the formation of HSCl, which is the intermediate that then undergoes redox reactions. Such a mechanism is exothermic and spontaneous, according to the computational results, and produces elementary sulfur in agreement with the experimental facts.

Completo

KIENINGER, MARTINA; VENTURA, O.N.

On the structure, infrared and Raman spectra of the 2:1 cysteine-Zn complex. Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 125 3-6, p.: 279 - 291, 2010

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 1432881X



Completo

E. BERMUDEZ; VENTURA, O.N.; SAENZ-MENDEZ, P

Mechanism of Organocatalyzed Decarboxylative Knoevenagel-Doebner Reaction. A Theoretical Study. The Journal of Physical Chemistry, v.: 114 50, p.: 13086 - 13092, 2010

Palabras clave: Knoevenagel;Doebner Reaction

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Papel ; Lugar de publicación: USA ; ISSN: 15205207 ; DOI: 10.1021/jp109703f

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp109703f>

We have investigated important intermediates and key transition states of the organocatalyzed Knoevenagel condensation using density functional theory and two different basis sets (6-31 G(d,p) and 6-311++G(2df,2pd)), both in gas phase and simulating the bulk solvent (pyridine) using the PCM method. Calculated structures for reactants, intermediates, and key transition states suggest that the secondary amine catalyst is essential, both for activating the aldehyde for nucleophilic attack, and in the possible decarboxylation pathways. The calculated results are shown to agree with available experimental information. On the basis of the results obtained, the studied mechanism may be important in the understanding of vinylphenol production during malting and brewing of wheat and barley grains.



Completo

FACCIO, R.; WERNER, L. F.; PARDO, H.; GOYENOLA, C.; VENTURA, O.N.; MOMBRU, A. W.

Electronic and structural distortions in graphene induced by carbon vacancies and boron doping. The Journal of Physical Chemistry, v.: 44, p.: 18961 - 18971, 2010

Palabras clave: Boron Doping; Graphene

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Papel ; Lugar de publicación: USA ; ISSN: 15205207 ; DOI: 10.1021/jp106764h

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp106764h>

We present an ab initio—DFT/GGA—study on the structural and electronic distortions of modified graphene by the creation of vacancies, the inclusion of boron atoms, and the coexistence of both, by means of total energy and band structure calculations. In the case of coexistence of boron atoms and vacancy, the modified graphene presents spin polarization only when B atoms locate far from vacancy. Thus, when a boron atom fills single and divacancies, it suppresses the spin polarization of the charge density. In particular, when B atoms fill a divacancy, a new type of rearrangement occurs, where a stable BC<sub>4</sub> unit is formed inducing important out-of-plane distortions to graphene. All these findings suggest that new chemical modifications to graphene and new types of vacancies can be used to modify its electronic properties.

Sistema Nacional de Investigadores 

Completo

SAENZ-MENDEZ, P; CACHAU, R.E.; SEOANE, G; VENTURA, O.N.

Regioselective epoxide ring-opening using boron trifluoride diethyl etherate: DFT study of an alternative mechanism to explain the formation of syn-fluorohydrins. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 904 1-3, p.: 21 - 27, 2009

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 01661280



Completo

KIENINGER, MARTINA; SAENZ-MENDEZ, P; VENTURA, O.N.

On the experimental structure of monoperoxocarbonic acid and the enthalpy of formation of carbonic acid, peroxyformic acid and monoperoxocarbonic acid in gas phase. Chemical Physics Letters, v.: 480 1-3, p.: 52 - 56, 2009

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614



Completo

SAENZ-MENDEZ, P; ERIKSSON, L. F.; VENTURA, O.N.

Theoretical study of the structure of neutral, radical and anionic monoperoxo carbonic acid. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 913 1-3, p.: 131 - 138, 2009

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 01661280



Completo

GANCHEFF, J.; KREMER, C.; VENTURA, O.N.

Interaction of simple ions with water: Theoretical models for the study of ion hydration. Journal of Chemical Education, v.: 86 12, p.: 1403 - 1407, 2009

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00219584



Completo

BLAKELEY, M. P.; RUIZ, F.; CACHAU, R.E.; HAZEMANN, I.; MEILLEUR, F.; MITSCHLER, A.; GINELL, S.; AFONINE, P.; VENTURA, O.N.; COUSIDO-SIAH, A.; HAERTLEIN, M.; JOACHIMIAK, A.; MYLES, D.; PODJARNY, A. D.

Quantum model of catalysis based on a mobile proton revealed by subatomic x-ray and neutron diffraction studies of h-aldose reductase.. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, v.: 105, p.: 1844 - 1848, 2008

Palabras clave: *proteins, molecular dynamics*

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Física Molecular

Medio de divulgación: *Papel* ; Lugar de publicación: *USA* ; ISSN: *00278424* ; Idioma/Pais: *Inglés/Estados Unidos*



Completo

GANCHEFF, J.; KREMER, C.; SEOANE, G; VENTURA, O.N.; DOMINGUEZ, S.

Conformational analysis of trans-[ReO2(pn)2]+ in aqueous solution by NMR and DFT calculations. Journal of Molecular Structure, v.: 892 1-3, p.: 21 - 27, 2008

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

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

<http://dx.doi.org/10.1016/j.molstruc.2008.05.008>



Completo

KIENINGER, MARTINA; CACHAU, R.E.; OBERHAMMER, H.; VENTURA, O.N.

Comparison of large basis set DFT and MP2 calculations in the study of the barrier for internal rotation of 2,3,5,6-tetrafluoroanisole. International Journal of Quantum Chemistry, v.: 107, p.: 403 - 417, 2007

Medio de divulgación: Papel ; Lugar de publicación: USA ; ISSN: 00207608 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos

Completo

MENDEZ, E.; CERDA, M. F.; GANCHEFF, J.; TORRES, J.; KREMER, C.; CASTIGLIONI, J.; KIENINGER, MARTINA; VENTURA, O.N. Adsorption of 2-thiobarbituric acid on gold nanoparticles. Identification of tautomeric forms. *Journal of Physical Chemistry C*, v.: 111, p.: 3369 - 3383, 2007

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* USA ; *ISSN:* 19327447 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

CACHAU, R.E.; GONZALEZ-NILO, D.; VENTURA, O.N.; FRITTS, M. J.

In-silico nanobio-design. A new frontier in computational biology. *Current Topics in Medicinal Chemistry*, v.: 7, p.: 1537 - 1540, 2007

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* USA ; *ISSN:* 15680266 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

VENTURA, O.N.; MOMBRU, A.W.

Use of bibliometric information to assist research policy making. A comparison of publication and citation profiles of Full and Associate Professors at a School of Chemistry in Uruguay. *Scientometrics*, v.: 69, p.: 287 - 313, 2006

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Netherlands ; *ISSN:* 01389130 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda

<http://www.springerlink.com/content/e6288423j7n8ut63/?p=8d99a96677474093a3ef4573571f713b&pi=0>

Publication and citation profiles of Full and Associate Professors at the School of Chemistry of the Universidad de la República in Uruguay were investigated. The groups do not exhibit markedly different age averages. However, the average time since they started publishing, as well as other characteristics of their publication records, like productivity or citations, set them apart. From the point of view of both the number of papers per author and per year of activity, on one side, and of the number of citations per year of activity, on the other, the group of Full Professors has statistically significant larger averages than the Associate Professors. The impact of self-citations, multi-authorship and internationalization of the publications were analyzed within the two groups and shown to have no excessive or predictable influence on those parameters, except in the case of few (&#8804; 2) or many (>8) authors. It is suggested in this paper that these two indicators, number of papers per author per production year and number of citations per production year, combined in a plot allowing a bidimensional ranking of the individuals in the groups, may be used profitably as one of the components in the development of a policy toward promotion of Associate Professors. The analysis showed also that the quotient of citations received to number of papers published, even when derived from actual citation data of the scientists without involving the impact factors of the journals in which they publish, are not good parameters to use for that purpose, essentially because there is a reduction in the information content of the indicator with respect to those described before.

Completo

VENTURA, O.N.; SAENZ-MENDEZ, P; CACHAU, R.E.; SEOANE, G; KIENINGER, MARTINA

A new perspective in the Lewis acid catalyzed ring opening of epoxides. Theoretical study of some complexes of methanol, acetic acid, dimethylether, diethylether and ethylene oxide with boron trifluoride. *Journal of Physical Chemistry A*, v.: 110, p.: 11734 - 11751, 2006

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* USA ; *ISSN:* 10895639 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

GANCHEFF, J.; KREMER, C.; VENTURA, O.N.; DOMINGUEZ, S.; BAZZICALUPI, C.; BIANCHI, A.; SUESCUN, L.; MOMBRÚ, A.W.

ReO<sub>2</sub><sup>+</sup> chelates with aliphatic diamines. Structural and proton transfer properties. *New Journal of Chemistry*, v.: 30, p.: 1650 - 1654, 2006

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 11440546 ; *Idioma/Pais:* Inglés/

Completo

VENTURA, O.N.; SEGOVIA, M.E.

Density functional computational thermochemistry. Accurate determination of the enthalpy of formation of perfluoropropane from DFT and ab initio calculations on isodesmic reactions. Chemical Physics Letters, v.: 403 4-6, p.: 378 - 384, 2005

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda



Completo

BELYAKOV, A.V.; VENTURA, O.N.; KIENINGER, MARTINA; CACHAU, R.E.; OBERHAMMER, H.

Molecular structure and internal rotation of 2,3,5,6-tetrafluoroanisole as studied by gas-phase electron diffraction and quantum chemical calculations. Journal of Physical Chemistry A, v.: 109 2, p.: 394 - 399, 2005

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 10895639 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



Completo

KIENINGER, MARTINA; VENTURA, O.N.; DIERCKSEN, G.H.F.

A comparative density functional study of the torsional potential of 4-fluoro (trifluoromethoxy)benzene and related species. Chemical Physics Letters, v.: 389 4-6, p.: 405 - 412, 2004

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda



Completo

DENIS, P.; VENTURA, O.N.; MAI, H.T.; NGUYEN, M.T.

Ab Initio and Density Functional Study of Thionitroso XNS and Thiazyl Isomers XSN, X = H, F, Cl, Br, OH, SH, NH<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>, CF<sub>3</sub>, and SiF<sub>3</sub>. Journal of Physical Chemistry A, v.: 108 23, p.: 5073 - 5080, 2004

Medio de divulgación: Otros ; ISSN: 10895639 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



Completo

DENIS, P.; VENTURA, O.N.

CCSDT study of the fluoroperoxy radical, FOO. Chemical Physics Letters, v.: 385 3-4, p.: 292 - 297, 2004

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda



Completo

DENIS, P.; VENTURA, O.N.

CCSDT study of the fluoroperoxy radical, FOO (Errata, vol 385, pg 292, 2004). Chemical Physics Letters, v.: 395 4-6, p.: 385 - 386, 2004

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda



Completo

VEGA-TEIJIDO, M.; ZUCKERMAN-SCHPECTOR, J.; VENTURA, O.N.; CARILLO, R.L.; CARACELLI, I.; GUADAGNIN, R.C.; BRAGA, A.L.; SILVEIRA, C.C.

Dichloro(cyclohexilidene-1-methylene)(phenyl)Te(IV). Looking for the theoretical treatment. Zeitschrift für Kristallographie, v.: 219 10, p.: 652 - 658, 2004

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00442968 ; Idioma/Pais: Inglés/Alemania





Completo

CACHAU, R.E.; GONZÁLEZ-SAPIENZA, G.; BURT, S.; VENTURA, O.N.

A new addition to the structural bioinformatics toolbox: 3D models of short bioactive peptides from multiple sequences using feedback restrained molecular dynamics (FRMD). Cellular and Molecular Biology, v.: 49 6, p.: 973 - 983, 2003

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 01455680 ; Idioma/Pais: Inglés/Francia



Completo

DENIS, P.A.; KIENINGER, MARTINA; VENTURA, O.N.; CACHAU, R.E.; DIERCKSEN, G.H.F.

Complete basis set and density functional determination of the enthalpy of formation of the controversial HO3 radical. A discrepancy between theory and experiment (erratum, vol 365, pg 440, 2002). Chemical Physics Letters, v.: 377 3-4, p.: 483 - 484, 2003

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda



Completo

VENTURA, O.N.; KIENINGER, MARTINA; DENIS, P.A.

Density functional computational thermochemistry: Determination of the enthalpy of formation of methanethial-S,S-dioxide (sulfene). Journal of Physical Chemistry A, v.: 107 4, p.: 518 - 521, 2003

Medio de divulgación: Otros ; ISSN: 10895639 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



Completo

DENIS, P.A.; VENTURA, O.N.; LE, H.T.; NGUYEN, M.T.

Density functional study of the decomposition pathways of nitroethane and 2-nitropropane. Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 5 9, p.: 1730 - 1738, 2003

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



Completo

PARKER, C.L.; VENTURA, O.N.; BURT, S.; CACHAU, R.E.

DYNGA: a general purpose QM-MM-MD program. I. Application to water. Molecular Physics, v.: 101 17, p.: 2659 - 2668, 2003

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00268976 ; Idioma/Pais: Inglés/Gran Bretaña



Completo

VENTURA, O.N.; NASCIMENTO, M.A.C.; ECHAVE, J.

The QUITEL-2002. Preface. Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 110, 6, p.: 359 - 359, 2003

Medio de divulgación: Otros ; ISSN: 1432881X ; Idioma/Pais: Inglés/Alemania



Completo

DENIS, P.A.; KIENINGER, MARTINA; VENTURA, O.N.; CACHAU, R.E.; DIERCKSEN, G.H.F.

Complete basis set and density functional determination of the enthalpy of formation of the controversial HO3 radical: a discrepancy between theory and experiment. Chemical Physics Letters, v.: 365 5-6, p.: 440 - 449, 2002

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda



Completo

VENTURA, O.N.; KIENINGER, MARTINA

Computational determination of the enthalpy of formation of alkylthial S-oxides and alkylthione S-oxides: a study of (Z)-propanethial-S-oxide, the lachrymatory factor of the onion (*Allium cepa*). *Physical Chemistry Chemical Physics*, v.: 4 18,, p.: 4328 - 4333, 2002

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 14639076 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Gran Bretaña



SCOPUS

Completo

VENTURA, O.N.; KIENINGER, MARTINA; DENIS, P.A.; CACHAU, R.E.

Density functional computational thermochemistry: solving the discrepancy between MO and DFT calculations on the enthalpy of formation of sulfine, CH<sub>2</sub>=S=O. *Chemical Physics Letters*, v.: 355 3-4, p.: 207 - 213, 2002

*Medio de divulgación:* Otros ; *ISSN:* 00092614 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda



SCOPUS

Completo

GANCHEFF, J.; KREMER, C.; KREMER, E.; VENTURA, O.N.

Density functional study of technetium and rhenium compounds. *Journal of Molecular Structure Theochem*, v.: 580, p.: 107 - 116, 2002

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 01661280 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda



SCOPUS

Completo

MOMBRÚ, A.W.; GOETA, A.W.; PARDO, H.; LISBOA, P.N.; SUESCUN, L.; MARIEZCURRENA, R.A.; VENTURA, O.N.; BEHAK, R.; ANDERSEN, K.H.; ARAÚJO-MOREIRA, F.M.

Low-temperature magnetic properties of LuBaCuFeO<sub>5+delta</sub> and TmBaCuFeO<sub>5+delta</sub>. *Journal of Solid State Chemistry*, v.: 166 1, p.: 251 - 258, 2002

*Medio de divulgación:* Otros ; *ISSN:* 00224596 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

VENTURA, O.N.; KIENINGER, MARTINA; DENIS, P.A.; CACHAU, R.E.

Density functional computational thermochemistry: Isomerization of sulfine and its enthalpy of formation. *Journal of Physical Chemistry A*, v.: 105 43, p.: 9912 - 9916, 2001

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 10895639 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

VENTURA, O.N.; DENIS, P.A.

Density functional investigation of atmospheric sulfur chemistry II. The heat of formation of the XS<sub>2</sub> radicals X = H, CH<sub>3</sub>. *Chemical Physics Letters*, v.: 344 1-2, p.: 221 - 228, 2001

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 00092614 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda



SCOPUS

Completo

DENIS, P.A.; VENTURA, O.N.

Hydroxamic chelates of boric acids, a density functional study. *Journal of Molecular Structure Theochem*, v.: 537, p.: 173 - 180, 2001

*Medio de divulgación:* Otros ; *ISSN:* 01661280 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda



SCOPUS

Completo

GANCHEFF, J.; MELIAN, C.; KREMER, C.; DOMINGUEZ, S.; MEDEROS, A.; VENTURA, O.N.; KREMER, E.

Synthesis, characterization and solution chemistry of new Re(V) dioxo complexes. Journal of Coordination Chemistry, v.: 54 3-4, p.: 285 - 296, 2001

Medio de divulgación: Otros ; ISSN: 00958972 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



Completo

KREMER, C.; MELIAN, C.; TORRES, J.; JUANICÓ, M.P. ; LAMAS, C.; PEZAROGLO, H.; MANTA, E. ; SCHUMANN, H.; PICKARDT, J.; GIRGSDIES, F.; VENTURA, O.N.; LLORET, F.

Synthesis, structure and magnetic properties of Mn(II) and Cu(II) complexes with the dicyano-acetic acid methyl ester anion. Inorganica Chimica Acta, v.: 314 1-2, p.: 83 - 90, 2001

Medio de divulgación: Otros ; ISSN: 00201693 ; Idioma/Pais: Inglés/Italia



Completo

VENTURA, O.N.; KIENINGER, MARTINA; CACHAU, R.E.; SUHAI, S.

Density Functional Computational Thermochemistry. Determination of the Enthalpy of Formation of Sulfine, CH<sub>2</sub>=S=O, at Room Temperature. Chemical Physics Letters, v.: 329 1-2, p.: 145 - 153, 2000

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda



Completo

DENIS, P.A.; VENTURA, O.N.

Density functional investigation of atmospheric sulfur chemistry. I. Enthalpy of formation of HSO and related molecules. International Journal of Quantum Chemistry, v.: 80 3, p.: 439 - 453, 2000

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00207608 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



Completo

ESTIÚ, G.; RAMA, J.B.; PEREIRA, A.; CACHAU, R.E.; VENTURA, O.N.

A theoretical study of excited state proton transfer in 3-hydroxychromone and related molecules. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 487 3, p.: 221 - 230 , 1999

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



Completo

VENTURA, O.N.; CACHAU, R.E.; KIENINGER, MARTINA

Density Functional and Coupled-Cluster Calculations of Isodesmic Reactions Involving Fluorine Oxides. Chemical Physics Letters, v.: 301 3-4, p.: 331 - 335, 1999

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda



Completo

VENTURA, O.N.; KIENINGER, MARTINA; CACHAU, R.E.

Density Functional Theory is more Accurate than Coupled-Cluster Theory in the Study of the Thermochemistry of Species Containing the FO Bond. Journal of Physical Chemistry A, v.: 103 1, p.: 147 - 151, 1999

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 10895639 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



Completo

GAMBINO, D.; KREMER, E.; BARAN, E.J.; MOMBRÚ, A.W.; SUESCUN, L.; MARIEZCURRENA, R.; KIENINGER, MARTINA; VENTURA, O.N.

Synthesis, Characterization and Crystal Structure of [ReO(Me4tu)4](PF6)3. Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie, v.: 625 5, p.: 813 - 819, 1999

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00442313 ; Idioma/Pais: Inglés/Alemania



SCOPUS

Completo

KIENINGER, MARTINA; SEGOVIA, M.E.; VENTURA, O.N.

A discrepancy between experimental and theoretical thermochemical characterization of some oxygen fluorides. Chemical Physics Letters, v.: 287 5-6, p.: 597 - 600, 1998

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda



SCOPUS

Completo

VENTURA, O.N.

AccuModel v1.1 for Windows95. Journal of Chemical Information and Computer Sciences, v.: 38 4, p.: 768 - 770, 1998

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00952338 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

VENTURA, O.N.; KIENINGER, MARTINA

Computational Chemistry as an Analytical Tool: Thermochemical Examples in Atmospheric Chemistry. Pure and Applied Chemistry, v.: 70 12, p.: 2301 - 2307, 1998

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00334545 ; Idioma/Pais: Inglés/Gran Bretaña



SCOPUS

Completo

KIENINGER, MARTINA; VENTURA, O.N.; SUHAI, S.

Density Functional Investigations of Carboxyl Free Radicals: Formyloxyl, Acetyloxyl and Benzoyloxyl Radicals. International Journal of Quantum Chemistry, v.: 70 2, p.: 253 - 267, 1998

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00207608 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

KIENINGER, MARTINA; VENTURA, O.N.; SUHAI, S.

Glycine conformations: gradient corrected DFT studies. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 433 201, p.: 193, 1998

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



SCOPUS

Completo

VENTURA, O.N.; KIENINGER, MARTINA; SUHAI, S.; DIERCKSEN, G.H.F.

The water dimer: ab initio and density functional calculations on the potential energy surface. Molecular Engineering, v.: 7, p.: 317 - 325, 1998

Palabras clave: Química computacional

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 09255125 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda

Completo

VENTURA, O.N.; KIENINGER, MARTINA; CERNUSAK, I.

An analysis of static dipole polarizabilities using density functional theory: N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, F- and HF. Journal of Molecular Structure, v.: 437, p.: 489 - 501, 1997

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



Completo

KIENINGER, MARTINA; IRVING, K.; RIVAS-SILVA, F.; PALMA, A.; VENTURA, O.N.

Density functional and ab initio study of the free radical MgNC. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 422, p.: 133 - 141, 1997

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



Completo

SEGOVIA, M.E.; VENTURA, O.N.

Density Functional and G2 Study of the strength of the OH Bond in CF<sub>3</sub>OH. Chemical Physics Letters, v.: 277 5-6, p.: 490 - 496, 1997

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda



Completo

VENTURA, O.N.; KIENINGER, MARTINA; IRVING, K.

Density Functional Theory: A Useful Tool for the Study of Free Radicals. Advances in Quantum Chemistry, v.: 28, p.: 293 - 309, 1997

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00653276 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



Completo

KARWOWSKI, J.; VENTURA, O.N.; BANCEWICZ, M.

Density of leves in vibrational spectra of molecules. International Journal of Quantum Chemistry, v.: 63 4, p.: 835 - 842, 1997

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00207608 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



Completo

VENTURA, O.N.; KIENINGER, MARTINA

Equilibrium structure of the carbon dioxide water complex in the gas phase: An ab initio and density functional study. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 390, p.: 157 - 167, 1997

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



Completo

KREMER, C.; GANCHEFF, J.; KREMER, E.; MOMBRÚ, A.W.; GONZÁLEZ, O.; MARIEZCURRENA, R.; SUESCUN, L.; CUBAS, M.L.; VENTURA, O.N.

Structural and conformational analysis of Tc(V) and Re(V) dioxocomplexes. X-ray structure of [TcO<sub>2</sub>(tn)<sub>2</sub>].H<sub>2</sub>O. Polyhedron, v.: 16 19, p.: 3311 - 3316, 1997

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 02775387 ; Idioma/Pais: Inglés/Gran Bretaña



Completo

VENTURA, O.N.; KIENINGER, MARTINA; COITIÑO, E.L.

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 01928651 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

VENTURA, O.N.

Transition states for H-radical reactions: LiFH as a stringent test case for density functional methods. Molecular Physics, v.: 89 6, p.: 1851 - 1870, 1996

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00268976 ; Idioma/Pais: Inglés/Gran Bretaña



SCOPUS

Completo

FERREIRA, E.; GARDIOL, P.; SOSA, R.M.; VENTURA, O.N.

Ab initio MP2, MCSCF and MR-SDCI study on the structure of O4 and comparison with the hypervalent CO3 and SO3 species. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 335, p.: 63 - 68, 1995

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



SCOPUS

Completo

VENTURA, O.N.; RAMA, J.B.; TURI, L.; DANNENBER, J.J.

Gas-phase structure and acidity of formohydroxamic acid and formamide: a comparative ab initio study. Journal of Physical Chemistry, v.: 99 1, p.: 131 - 136, 1995

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00223654 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

COITIÑO, E.L. ; PEREIRA, A.; VENTURA, O.N.

High level ab initio prediction of the structure and infrared spectra of formaldehyde-water radical-cation complexes. Journal of Chemical Physics, v.: 102 7, p.: 2833 - 2840, 1995

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00219606 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

VENTURA, O.N.; LATAJKA, Z.; RATAJACK, H.; ORVILLE-THOMAS, W.J.

On the structure of the 3B1 excited state of water. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 334 2-3, p.: 127 - 136, 1995

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



SCOPUS

Completo

VENTURA, O.N.; KIENINGER, MARTINA

The FO2 radical: a new success of density functional theory. Chemical Physics Letters, v.: 245 4-5, p.: 488 - 497, 1995

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda



SCOPUS

Completo

PEREIRA, A.; COITIÑO, E.L. ; VENTURA, O.N.

Ab initio study of the structure of radical cations derived from H-bonded complexes: a comparison between [H<sub>2</sub>CO.H<sub>2</sub>O]<sup>+</sup> and [H<sub>2</sub>CO.HF]<sup>+</sup>. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 120 1-2, p.: 31 - 38, 1994

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



Completo

VILA, F.; VENTURA, O.N.; VARELA, J.A.; LONGO, E.

An AM1 semiempirical study of the mechanism of sintering for ZnO in the presence of water and carbon monoxide. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 111, p.: 175 - 184, 1994

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



Completo

COITIÑO, E.L. ; TOMASI, J.; VENTURA, O.N.

Importance of water in the aldol condensation reactions of acetaldehyde. Journal of the Chemical Society-Faraday Transactions II, v.: 90 12, p.: 1745 - 1755, 1994

Palabras clave: Química computacional

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 03009238 ; Idioma/Pais: Inglés/Gran Bretaña

Completo

VENTURA, O.N.; IRVING, K.; LATAJKA, Z.

The dimerization shift of the OH-stretching fundamentals of the water dimer. Chemical Physics Letters, v.: 217 4, p.: 436 - 442, 1994

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda



Completo

COITIÑO, E.L. ; LLEDOS, A.; SERRA, R.; BERTAN, J.; VENTURA, O.N.

Ab-initio study of structure and reactivity of H<sub>2</sub>CO.H<sub>2</sub>O-center-DOT<sup>+</sup> and related radical cations. Journal of the American Chemical Society, v.: 115 20, p.: 9121 - 9126, 1993

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00027863 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



Completo

RAMA, J.; TURI, L.; DANNENBERG, J.J.; VENTURA, O.N.

Acidity of hydroxamic acids: an ab initio and semiempirical study. Journal of the American Chemical Society, v.: 115 13, p.: 5754 - 5761, 1993

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00027863 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



Completo

COITIÑO, E.L. ; VENTURA, O.N.

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda



Completo

KARWOWSKI, J.; BANCEWICZ, M.; VENTURA, O.N.; DIERCKSEN, G.H.F.

Moments of energy level distributions in vibrational spectra. Journal of Physics A-Mathematical and General, v.: 26 20, p.: 5581 - 5593, 1993

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 03054470 ; Idioma/Pais: Inglés/Gran Bretaña



Completo

SOSA, R.M.; GARDIOL, P.; VENTURA, O.N.

Multi-reference CI calculation of the potential energy curves for OH-bond breaking in the ground and lowest excited states of the water monomer and dimer. Journal of Molecular Structure, v.: 297, p.: 337 - 345, 1993

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



Completo

VENTURA, O.N.; CUBAS, M.L.

A semi-empirical study of the reaction of the hemimercaptal of methylglyoxal and glutathione at the active center of Glyoxalase I. International Journal of Quantum Chemistry, v.: 44 5, p.: 699 - 722, 1992

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00207608 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



Completo

SOSA, R.M.; IRVING, K.; VENTURA, O.N.

Ab initio characterization of possible dissociation pathways for multiphoton ionization of the water dimer in supersonic free jets. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 86, p.: 453 - 463, 1992

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



Completo

VENTURA, O.N.; COITIÑO, E.L. ; LLEDOS, A.; BERTRAN, J.

Analysis of the gas-phase addition of water to formaldehyde. A semiempirical and ab initio study of bifunctional catalysis by H<sub>2</sub>O. Journal of Computational Chemistry, v.: 13 9, p.: 1037 - 1046, 1992

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 01928651 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



Completo

COITIÑO, E.L. ; VENTURA, O.N.; SOSA, R.M.

Comparative ab initio and semi-empirical study of hydrogen-bonded complexes of NH<sub>3</sub> and H<sub>2</sub>O. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 86, p.: 315 - 328, 1992

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



Completo

TURI, L.; DANNENBERG, J.J.; RAMA, J.; VENTURA, O.N.

Molecular orbital study of the structures of hydroxamic acids. Journal of Physical Chemistry, v.: 96 9, p.: 3709 - 3712, 1992

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00223654 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos





Completo

VENTURA, O.N.; CUBAS, M.L.

A conformational study of the hemimercaptal of methylglyoxal and glutathione including the study of solvent effects. Journal of the Brazilian Chemical Society, v.: 2 3, p.: 111 - 117, 1991

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 01035053 ; Idioma/Pais: Inglés/Brasil



Completo

SOLA, M.; LLEDOS, A.; DURAN, M.; BERTRAN, J.; VENTURA, O.N.

Ab initio study of substituent effect on the addition of hydrogen fluoride to fluoroethylenes. Journal of Computational Chemistry, v.: 11 2, p.: 170 - 180, 1990

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 01928651 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



Completo

VENTURA, O.N.; COITIÑO, E.L. ; IRVING, K.; IGLESIAS, A.; LLEDOS, A.

Comparison of semiempirical and BSSE corrected Moller-Plesset ab initio calculations on the direct addition of water to formaldehyde. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 69, p.: 427 - 440, 1990

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



Completo

DEBLUMENFELD, M.P.; HIKICHI, N.; HANSZ, M.; VENTURA, O.N.

Molecular modelling of glutathione: a comparison with crystallographic data. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 69, p.: 467 - 475, 1990

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



Completo

COITIÑO, E.L. ; IRVING, K.; RAMA, J.; IGLESIAS, A.; DEBLUMENFELD, M.P.; VENTURA, O.N.

Theoretical studies of hydrogen bonded complexes using semiempirical methods. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 69, p.: 405 - 426, 1990

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



Completo

VENTURA, O.N.; COITIÑO, E.L. ; LLEDOS, A.; BERTRAN, J.

AM1 study of hydrogen-bonded complexes of water. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 56, p.: 55 - 68, 1989

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



Completo

COITIÑO, E.L. ; VENTURA, O.N.

Aplicación de métodos semiempíricos derivados del MNDO a la determinación de la estructura y rectitud de complejos de enlace de hidrógeno. Folia Chimica Theoretica Latina, v.: 17, p.: 191 - 223, 1989

Palabras clave: Química computacional

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 03784843 ; Idioma/Pais: Español/España

Completo

VENTURA, O.N.; LLEDOS, A.; BONACCORSI, R.; BERTRAN, J.; TOMASI, J.

Theoretical study of reaction mechanisms for the ketonization of vinyl alcohol in gas phase and aqueous solution. *Theoretica Chimica Acta*, v.: 72 3, p.: 175 - 195, 1987

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 00405744 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Alemania



SCOPUS

Completo

CLAVERO, C.; DURAN, M.; LLEDOS, A.; VENTURA, O.N.; BERTRAN, J.

Theoretical study of the addition of hydrogen halides to olefins: a comparison between (HCl)<sub>2</sub> and (HF)<sub>2</sub> additions to ethylene. *Journal of Computational Chemistry*, v.: 8 4, p.: 481 - 488, 1987

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 01928651 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



Completo

LLEDOS, A.; BERTRAN, J.; VENTURA, O.N.

Solvent intervention in keto-enolic tautomerisms. *Afinidad*, v.: 43, p.: 486 - 487, 1986

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 00019704 ; *Idioma/Pais:* Inglés/España



latindex

Completo

CLAVERO, C.; LLEDOS, A.; DURAN, M.; VENTURA, O.N.; BERTRAN, J.

Theoretical study of the addition of hydrogen halides to olefins - Reaction of dimeric hydrogen-fluoride with ethylene. *Journal of the American Chemical Society*, v.: 108 5, p.: 923 - 928, 1986

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 00027863 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

LLEDOS, A.; BERTRAN, J.; VENTURA, O.N.

Water-chain intervention in the ketonization of vinyl alcohol. An ab initio study. *International Journal of Quantum Chemistry*, v.: 30 4, p.: 467 - 477, 1986

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 00207608 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



Completo

VENTURA, O.N.; BARTOLUCCI, P.; SOSA, R.M.

He<sub>2</sub>(2+). A comparison between Roothan-Hartree-Fock and density functional methods. *International Journal of Quantum Chemistry*, v.: 27 5, p.: 625 - 635, 1985

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 00207608 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

VENTURA, O.N.; BARTOLUCCI, P.

On the application of some solvation models to the water dimer. *Chemical Physics Letters*, v.: 64 4, p.: 229 - 248, 1984

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 00092614 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda



SCOPUS

Completo

CASTRO, M. ; KELLER, J.; VENTURA, O.N.

Ground-state of the HE22+ molecular ion computed with density functional techniques. Journal of Chemical Physics, v.: 77 12, p.: 638 - 6350, 1982

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00219606 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



Completo

VENTURA, O.N.; SOSA, R.M.

Estudios sobre la teoría electrónica del cáncer.II.La interacción de la N-Metilglioxalimida con un dipéptido. Acta Sudamericana de Química, v.: 1, p.: 57 - 67, 1981

Palabras clave: Química computacional

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

Medio de divulgación: Otros ; ISSN: 07160402 ; Idioma/Pais: Español/Chile

Completo

VENTURA, O.N.; SOSA, R.M.; LIBERLES, A. ; SALGADO, G.

Interacción del metilglioxal con la formamida. Revista de la Real Acad de Ciencias Exactas Fisicas y Naturales de Madrid, v.: 74, p.: 547 - 565, 1980

Palabras clave: Química computacional

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00340596 ; Idioma/Pais: Español/España

Completo

VENTURA, O.N.; SOSA, R.M.; LIBERLES, A.

Quantum-mechanical study of Methyl fluoroformate. Chemical Physics Letters, v.: 70 1, p.: 170 - 174, 1980

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda



Completo

SOSA, R.M.; VENTURA, O.N.; LIBERLES, A.

The cis-trans energy difference in Bi-1-cyclopropen-1-yl and related compounds. Theoretica Chimica Acta, v.: 56 2, p.: 157 - 162, 1980

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00405744 ; Idioma/Pais: Inglés/Alemania



Completo

VENTURA, O.N.

Estudio de la influencia de la deslocalización en la conformación de derivados del glioxal. Anales de La Facultad de Química de Montevideo, v.: 9, p.: 59 - 70, 1979

Palabras clave: Química computacional; Análisis Conformacional

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

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

Completo

VENTURA, O.N.

Sobre la estadística en Mecánica Cuántica. La definición de valor medio. Anales de La Facultad de Química de Montevideo, v.: 8, p.: 129 - 145, 1978

Palabras clave: estadística

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

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

## Resumen

YEN P.; VENTURA, O.N.; BURT, S.; CACHAU, R.E.

Fast pattern recognition of protein three dimensional features using a bit-pattern approach as a prescreen. *Biophysical Journal*, v.: 2007, p.: 567A - 567A, 2007

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* USA ; *ISSN:* 00063495 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

## Resumen

CACHAU, R.E.; KRUMPE, L. R. H.; MORI, T.; VENTURA, O.N.; BURT, S.

Structural characterization of peptides from phage-display libraries. *Biophysical Journal*, v.: 2007, p.: 388A - 388A, 2007

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* USA ; *ISSN:* 00063495 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

## Resumen

CACHAU, R.E.; PODJARNY, A. D. ; RUIZ, F.; VENTURA, O.N.

Aldose reductase studied by comparative analysis of neutron scattering, X-ray ultra-high resolution and QM electron density maps and molecular dynamics. *Biophysical Journal*, v.: 2007, p.: 213A - 213A, 2007

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* USA ; *ISSN:* 00063495 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

## Artículos aceptados

### Capitulos de Libro

Capítulo de libro publicado

BOTTINELLI, F.; SAENZ.MÉNDEZ, P; VENTURA, O.N.

Computational Study of the Initial Step in the Mechanism of Dehaloperoxidase A: Determination of the Protonation Scheme at the Active Site and the Movement of the His55 Residue , 2015

*Libro:* Challenges in Computational Chemical Physics. Quantum Modeling of Complex Molecular Systems. v.: 21, p.: 1 - 20,

*Organizadores:* Jean Louis Rivail et al

*Editorial:* Springer , Heidelberg

*Palabras clave:* Proteínas, Enzimas, DFT

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

*Medio de divulgación:* Papel; *ISSN/ISBN:* 9783319216256; *En prensa:* Si

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

[www.springer.com](http://www.springer.com)

Dehaloperoxidase A (DHP A) is a detoxifying enzyme found in the marine worm *Amphitrite ornata*. This enzyme converts halophenols found in the environment where the worm lives, into quinones by dehalogenation. The enzyme has globin structure and function, but works also as a peroxidase in the presence of H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> which binds to the iron present in the heme group. The initial step in the enzymatic reaction path is the transformation of the heme Fe(II) ion into a ferryl (Fe = O) moiety. A distal histidine, His55, is crucial for this process. His55 can occupy two positions, either in the distal pocket of the active center ("closed"), or exposed to the solvent ("open"). NMR experiments show that His55 moves between those positions in the resting state of the enzyme. For this process to occur it is necessary that a gate, composed of a triad Asn37-Lys36-Lys51 and two carboxylates on the heme group, suffer a conformational change before and after the passage of the histidine. We examined computationally this process at the B3LYP/6-31G(d,p) level, within a PCM simulated aqueous environment. This analysis leads us to propose a correction of the experimental structure of the enzyme determined by X-ray crystallography and offers an explanation for different conformations of the twin carboxylates at the heme group observed in the crystals. This new proposal agrees with the experimentally determined electron density distributions and explains the role of the His55 as a functional hook for the peroxide in the aqueous media.

Capítulo de libro publicado

VENTURA, O.N.; SEGOVIA, M.E.; BADENES, M. P.; KIENINGER, MARTINA; BOTTINELLI, F.; IRVING, K.

*Computational Chemistry Tools for the Study of Environmental Chemistry Problems*, 2009

Libro: *New Developments in Quantum Chemistry*. p.: 109 - 164, India

Organizadores: A. J. Hernández, J. L Paz

Editorial: *Research Signpost*, Kerala

Areas del conocimiento: *Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional*

Medio de divulgación: *Papel*; Idioma/Pais: *Inglés/India*; En prensa: *Si*

Capítulo de libro publicado

VENTURA, O.N.

Chemical reactivity, 1992

Libro: *Structure, Interactions and Reactivity*. v.: 2, p.: 600 - 636, Holanda

Organizadores: Serafín Fraga

Editorial: Amsterdam

Areas del conocimiento: *Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional*

Medio de divulgación: *Otros*; Idioma/Pais: *Inglés/Holanda*;

Capítulo de libro publicado

VENTURA, O.N.

Procesos fisicoquímicos elementales y reacciones químicas, 1991

Libro: *Nuevas Tendencias en Química Teórica*. p.: 249 - 278, España

Organizadores: Serafín Fraga

Editorial: Madrid

Areas del conocimiento: *Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional*

Medio de divulgación: *Otros*; Idioma/Pais: *Español/España*;

Capítulo de libro publicado

VENTURA, O.N.

Modelos de Farmacología Teórica, 1983

Libro: *Temas de Farmacología y Terapéutica Veterinaria*. p.: 75 - 114, Uruguay

Organizadores: Juan Hollenweger

Editorial: Montevideo

Areas del conocimiento: *Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional*

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

Trabajos en eventos

Completo

IRVING, K; VENTURA, O.N.

Computational Approach to the Understanding of Lignin Residues Bleaching by Chlorine Dioxide , 2013

*Evento:* Internacional , 6th International Colloquium on Eucalyptus Pulp (6th ICEP) , Colonia del Sacramento , 2013

*Anales/Proceedings:* Proceedings of the 6th International Colloquium on Eucalyptus Pulp (6th ICEP)Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Madera, DFT, Pulpado

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

*Medio de divulgación:* CD-Rom;

*Financiación/Cooperación:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Beca

<https://drive.google.com/file/d/0B80kL1FdHLbJUldsRkh5bnd3cm8/edit>

A theoretical chemistry study of the species involved in the oxidation of phenol and substituted phenol to quinones by chlorine dioxide has been performed at different computational levels. Model chemistry calculations employing complete basis sets methods and density functional calculations using one of the most recently derived exchange-correlation functionals and a medium size basis sets were employed for the purpose. Initial complexes, transition states, intermediates and final products in gas phase (or non-dissociating solvents) as well as in bulk water simulated using a polarizable continuum, were investigated. The results show that the reaction with one chlorine dioxide molecule affords a tight molecular complex, where the chlorite ion stays linked to the phenoxy radical and water. Reaction with a second chlorine dioxide molecule produces several possible intermediates. From them, o- and p-quinone formation are equally probable for phenol, but para substitution is more likely when a methoxy group is present on an ortho carbon in phenol. In this case it is also observed the possible formation of formaldehyde and a ring-opening transition state that may lead to an intermediate which can proceed to muconic acid derivatives after reaction with hydroxide present in the basic media.

Resumen

VEGA-TEIJIDO, M.; BONTURI, C.; EL CHAMY MALUF, S.; SAMBRANO, J. R. ; VENTURA, O.N.

Estudios de docking y reactividad de derivados de 2-tiopiridina (2-tp) en catepsina B (CatB) , 2013

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

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

*Editorial:* Organizadores del 3er Encuentro Nacional de Ciencias Químicas-ENAQUI 3.0

*Palabras clave:* Química computacional

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

*Medio de divulgación:* Papel;

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

La catepsina B (CatB) es una cisteína proteasa humana de la superfamilia de la papaína que actúa en proteólisis y activación de otras proteasas. Su sobreactividad ha sido asociada a diversas patologías[1] como enfermedad de Alzheimer, esclerosis múltiple y cáncer. Los derivados de 2-tiopiridina inhiben covalentemente las cisteína proteasas[2]. En este trabajo presentamos un estudio mediante docking[3] de una serie de 6 compuestos (A-F) y cálculos DFT usando B3LYP/6-31+G\*\* para estudiar la reactividad y selectividad por CatB. Los resultados de docking de la serie muestran un score de unión aumentando en correlación con el tamaño del ligando (con valores entre 37,78 y 77,68 kcal/mol). Para los 3 ligandos mayores (D, E y F) se observa un mejor ajuste al sitio activo y una menor distancia (3,02 - 3,96Å) entre el S de la Cys29 y el S del ligando que reaccionará covalentemente. Los cálculos cuánticos de optimización de sistemas menores (modelados del sistema completo) evidenciaron la necesidad de que un N del ligando inicialmente se protone a expensas de la His199 para poder ser blanco del ataque nucleofílico del tiolato de la Cys29. En todos los casos se protona el N de R3 (en A un anillo 2-piridil). Estos resultados son una base para la comprensión de las características químicas y estructurales que pueden guiar el modelado y optimización de ligandos derivados de 2-tiopiridina como inhibidores de CatB y otras proteasas. [1] Lecaille, F. et al. Chem. Rev. 2002 102 12:4459-4488. [2] Otto, H. H. & Schirmeister, T. Chem. Rev. 1997 97: 133-171. [3] Programa GOLD: <http://www.ccdc.cam.ac.uk/Solutions/GoldSuite/Pages/GOLD.aspx>

## Producción técnica

### Trabajos Técnicos

*Informe o Pericia técnica*

VENTURA, O.N.

(varios) , *Divulgación técnica sobre problemas ambientales relacionados con industrias* , 2008

Medio de divulgación: *Internet*; Disponibilidad: *Irrestricta*; Ciudad: */Uruguay*

<http://lascosasdenestor.blogspot.com>

*Informe o Pericia técnica*

VENTURA, O.N.

(varios) , *Divulgación técnica sobre problemas ambientales relacionados con industrias* , 2007

Medio de divulgación: *Internet*; Disponibilidad: *Irrestricta*; Ciudad: */Uruguay*

<http://ascosasdenestor.blogspot.com>

## Otros

Organización de eventos

Congreso / Organización

Seminars of Molecular Physical Chemistry - III , 2002

Uruguay , Español , Otros

Montevideo

*Institución Promotora/Financiadora:* UDELAR

Organización de eventos

Congreso / Organización

XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina , 2002

Uruguay , Español , Otros

*Duración:* 1 semanas

Montevideo

*Institución Promotora/Financiadora:* UDELAR

Organización de eventos

Congreso / Organización

Seminars of Molecular Physical Chemistry - II , 2001

Uruguay , Español , Otros

*Duración:* 1 semanas

Montevideo

*Institución Promotora/Financiadora:* UDELAR

Organización de eventos

Congreso / Organización

Seminars of Molecular Physical Chemistry - I. , 2000

Uruguay , Español , Otros

*Duración:* 1 semanas

Montevideo

*Institución Promotora/Financiadora:* UDELAR

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores

Organización de eventos  
Congreso / Organización  
Spring Workshop in Quantum Chemistry , 1993  
Uruguay , Español , Otros  
*Duración:* 1 semanas  
Piriápolis  
*Institución Promotora/Financiadora:* Comisión de la CE

Organización de eventos  
Congreso / Organización  
II Escuela Latinoamericana de Química Teórica , 1982  
Uruguay , Español , Otros  
*Duración:* 2 semanas  
Montevideo  
*Institución Promotora/Financiadora:* UDELAR

## Evaluaciones

Evaluación de Publicaciones

2010 / 2010

*Nombre:* Journal of Molecular Modeling,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluador en la actualidad

Evaluación de Publicaciones

2009 / 2010

*Nombre:* European Journal of Medicinal Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluador en la actualidad

Evaluación de Publicaciones

2009 / 2010

*Nombre:* Journal of the Brazilian Chemical Society,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluador en la actualidad

Evaluación de Publicaciones

2009 / 2010

*Nombre:* Theoretical Chemistry Accounts,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluador en la actualidad

Evaluación de Publicaciones

2006 / 2010

*Nombre:* International Journal of Quantum Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluador en la actualidad

Evaluación de Publicaciones

2005 / 2007

*Nombre:* Journal of Medicinal Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5



Evaluación de Publicaciones

2002 / 2010

*Nombre:* Chemical Physics Letters,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluador en la actualidad

Evaluación de Publicaciones

2000 / 2010

*Nombre:* Journal of Physical Chemistry A,

*Cantidad:* Menos de 5

Evaluador en la actualidad

Evaluación de Publicaciones

2000 / 2010

*Nombre:* Journal of Molecular Structure Theochem,

*Cantidad:* De 5 a 20

Evaluador en la actualidad

## Formación de RRHH

### Tutorías concluidas

#### Posgrado

Tesis de doctorado

Estudio del movimiento del lazo flexible WPD de la proteína tirosina fosfatasa humana PTP1B y los factores que lo influyen , 2011

*Tipo de orientación:* Cotutor o Asesor

*Nombre del orientado:* Aline Katz

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Palabras clave:* bioquímica computacional; proteínas

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

*Medio de divulgación:* Papel, *Pais/Idioma:* Uruguay/Inglés

*Información adicional:* Tesis en cotutoría con Alberto Podjarny de la Universidad de Estrasburgo. Tesis y defensa realizadas íntegramente en inglés

Tesis de doctorado

Aspectos fisicoquímicos y sintéticos de la oligomerización de ciclohexadiendioses quirales , 2006

*Tipo de orientación:* Cotutor o Asesor

*Nombre del orientado:* SAENZ, Patricia

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Medio de divulgación:* Otros, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Los oligoinositoles conocidos tienen solamente un puente que conecta los monómeros, a semejanza de los oligosacáridos. La presencia de un único puente es deseable para las aplicaciones de estos compuestos como análogos (miméticos) de sacáridos debido a su semejanza, pero es detrimental para la rigidez de la molécula. Ya que las propiedades más interesantes parecen provenir de la disposición tridimensional, que depende directamente de la rigidez, es deseable contar con oligoinositoles más rígidos. Una de las modificaciones más directas para lograr este fin consiste en aumentar el número de puentes entre los monómeros. Se propone entonces la preparación de oligociclitolos (oligoinositolos y oligoconduritolos) con dos puentes de unión entre los monómeros, para realizar el estudio teórico y experimental de sus propiedades moleculares. La estructura de estos compuestos es totalmente nueva, no existiendo antecedentes de ciclitolos unidos entre sí por más de un puente

#### Tesis de doctorado

Química en solución acuosa de dioxocomplejos Re (V) , 2005

*Tipo de orientación:* Cotutor o Asesor

*Nombre del orientado:* GANCHEFF, Jorge

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Medio de divulgación:* Otros, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

#### Tesis de maestría

Estudio teórico y experimental de la conducción eléctrica del sistema  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{-xMxO}_7\text{-delta}$  (M=Fe, Co, Ni, Mn) en función de la sustitución química , 2004

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* RABUFFETTI, Federico

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Medio de divulgación:* Otros, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* El Plan de Trabajo del Postulante se centrará en el estudio experimental y computacional de compuestos en la serie  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{-xMxO}_7\text{-d}$  (M = Fe, Co, Ni, Mn). Esta serie está basada en el compuesto original  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7\text{-d}$  (YBCO), que es un cerámico superconductor a temperaturas inferiores a 92K. Este cerámico presenta líneas de  $\text{Cu}^{3+}$  y planos de  $\text{Cu}^{2+}$ , siendo estos últimos los responsables de la existencia de superconductividad. Este compuesto tiene comportamiento metálico a temperatura ambiente, pero éste se ve afectado cuando el compuesto se dopa con metales de transición que sustituyen al ion  $\text{Cu}^{2+}$  en los planos  $\text{CuO}_2$ . El interés en este sistema se ha visto reforzado recientemente por su capacidad de transferencia de iones oxo a través de los defectos inherentes a la estructura cristalina, lo que potencialmente es valioso por su posible empleo como membranas en celdas combustibles (SOFC, solid oxide fuel cells). Esta posible aplicación, de gran proyección tecnológica, depende de la disminución de la conductividad eléctrica del compuesto para impedir el cortocircuito del dispositivo. Esta disminución puede lograrse a través del dopado. Por lo tanto, el estudio de este sistema es importante tanto desde el tradicional enfoque de la superconductividad de alta temperatura crítica, como a partir de las aplicaciones más novedosas a nivel tecnológico, como es el caso de las celdas combustibles. En este trabajo de Maestría, se plantea una parte experimental que consistirá en la síntesis y determinación estructural de compuestos de la serie  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{-xMxO}_7\text{-d}$  (M = Fe, Co, Ni, Mn), los que, además, serán caracterizados desde el punto de vista eléctrico a través de su resistencia. Desde el punto de vista computacional, entretanto, se realizará un estudio de la estructura electrónica de los componentes de la serie. Para ello se emplearán programas de cálculo que permitan el estudio de bandas de los compuestos, empleando métodos de funcionales de la densidad para sistemas periódicos

#### Tesis de doctorado

Estudio teórico computacional de reacciones químicas de interés atmosférico , 2004

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* DENIS, Pablo

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Medio de divulgación:* Otros, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

#### Tesis de doctorado

Estudio computacional de la química atmosférica de los radicales  $\text{CF}_3\text{O}$ . Una contribución a la comprensión de las transformaciones de las especies hidrofluorocarbonadas en la atmósfera , 2004

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* SEGOVIA, Marc

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Medio de divulgación:* Otros, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

#### Tesis de maestría

Estudio teórico computacional de reacciones químicas de interés atmosférico , 2000

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* DENIS, Pablo

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Medio de divulgación:* Otros, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

#### Tesis de maestría

Estudio teórico-experimental de dioxo complejos de Re(V) y Tc(V) , 1999

*Tipo de orientación:* Cotutor o Asesor

*Nombre del orientado:* GANCHEFF, Jorge

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Medio de divulgación:* Otros, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

#### Tesis de maestría

Estudio MRCI de los estados excitados bajos del dímero de agua , 1995

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* VILA, Fernando

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Medio de divulgación:* Otros, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

#### Tesis de maestría

Estudio teórico computacional de la reacción catalizada por la enzima glioxalasa , 1993

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* CUBAS, María Luisa

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Medio de divulgación:* Otros, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

#### Tesis de maestría

Estudio teórico-experimental del efecto del H<sub>2</sub>O sobre las reacciones de condensación aldólica del acetaldehído , 1991

*Nombre del orientado:* COITIÑO, Elena Laura

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Medio de divulgación:* Otros, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

#### Tesis de maestría

Influencia de la estructura superficial del platino en la electroreducción del oxígeno molecular , 1991

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* ZINOLA, Carlos Fernando

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Medio de divulgación:* Otros, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

## Grado

#### Tesis/Monografía de grado

Computational Approach to the Understanding of Lignin Residues Bleaching by Chlorine Dioxide , 2013

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Kenneth Irving

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Química

*Palabras clave:* Madera, pulpado, DFT

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

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

*Información adicional:* A theoretical chemistry study of the species involved in the oxidation of phenol and substituted phenol to quinones by chlorine dioxide has been performed at different computational levels. Model chemistry calculations employing complete basis sets methods and density functional calculations using one of the most recently derived exchange-correlation functionals and a medium size basis sets were employed for the purpose. Initial complexes, transition states, intermediates and final products in gas phase (or non-dissociating solvents) as well as in bulk water simulated using a polarizable continuum, were investigated. The results show that the reaction with one chlorine dioxide molecule affords a tight molecular complex, where the chlorite ion stays linked to the phenoxyl radical and water. Reaction with a second chlorine dioxide molecule produces several possible intermediates. From them, o- and p-quinone formation are equally probable for phenol, but para substitution is more likely when a methoxy group is present on an ortho carbon in phenol. In this case it is also observed the possible formation of formaldehyde and a ring-opening transition state that may lead to an intermediate which can proceed to muconic acid derivatives after reaction with hydroxide present in the basic media.

## Tutorías en marcha

## Posgrado

Tesis de doctorado

Estudio del mecanismo de acción de dehaloperoxidasas , 2008

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Fiorentina Bottinelli

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

## Grado

Tesis/Monografía de grado

Estudio computacional de la molécula de insulina , 2015

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Francisco Laviano

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Química

*Palabras clave:* Insulina; Química Teórica

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

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

## Otras

Orientación de posdoctorado

Estudio Teórico Computacional de las reacciones de 2-fluoropropeno con Cl y OH , 2015

*Tipo de orientación:* Asesor/Orientador

*Nombre del orientado:* Cynthia Rivela

Universidad Nacional de Córdoba , Argentina

*Palabras clave:* Química atmosférica; Química Teórica

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

*Medio de divulgación:* Papel, *País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Formación de la estudiante en el uso del cluster para la realización de cálculos DFT sobre los compuestos citados. Además, cálculos de estados de transición, caminos de reacción y constantes de velocidad de reacción, empleando la teoría variacional del estado de transición. Se enmarca dentro de la tesis de doctorado de la estudiante (realizándose en la Universidad e Córdoba) sobre estudios teóricos y experimentales de las reacciones en la atmósfera de hidrocarburos insaturados halogenados.

## Otros datos relevantes

### Premios y títulos

2005 Fondo Nacional de Investigadores 2002-2004 MEC, CONICYT

1999 Premio Roberto Caldeyro Barcia PEDECIBA-PNUD, Uruguay

1999 Fondo Nacional de Investigadores 1999-2001 MEC, CONICYT Uruguay

1992 Mejor artículo de revisión en Química Cuántica Folia Chimica Theoretica Latina

1991 Premio Mejor Investigador Joven en Química MEC-CONICYT, Uruguay-TWAS, Italia

1981 Premio Nacional de Proyectos de Investigación MEC, CONICYT, Uruguay

2012 Sistema Nacional de Investigadores Nivel III (Nacional) ANII

Fui evaluado y seleccionado por segunda vez como Investigador Grado III del SNI en el año 2012.

2013 Profesor Titular Efectivo (G5) de Facultad de Química (Nacional) Facultad de Química, UdeLaR

Confirmado como Profesor Titular (G5) de Facultad de Química, Diciembre 2013

2014 Investigador Principal G5 (Nacional) Pedeciba

Reevaluado por árbitros internacionales y confirmado como Investigador Principal, G5, del Pedeciba, 25/6/2014

## Presentaciones en eventos

Congreso

Estudios de docking y reactividad de derivados de 2-tiopiridina (2-tp) en catepsina B (CatB) , 2013

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 3er Encuentro Nacional de Ciencias Químicas-ENAQUI 3.0 , Montevideo, Uruguay; *Nombre de la institución promotora:* Pedeciba Química

*Palabras clave:* Química computacional; docking; Tirosina proteasas

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Química Teórica y Computacional

La catepsina B (CatB) es una cisteína proteasa humana de la superfamilia de la papaína que actúa en proteólisis y activación de otras proteasas. Su sobreactividad ha sido asociada a diversas patologías[1] como enfermedad de Alzheimer, esclerosis múltiple y cáncer. Los derivados de 2-tiopiridina inhiben covalentemente las cisteína proteasas[2]. En este trabajo presentamos un estudio mediante docking[3] de una serie de 6 compuestos (A-F) y cálculos DFT usando B3LYP/6-31+G\*\* para estudiar la reactividad y selectividad por CatB. Los resultados de docking de la serie muestran un score de unión aumentando en correlación con el tamaño del ligando (con valores entre 37,78 y 77,68 kcal/mol). Para los 3 ligandos mayores (D, E y F) se observa un mejor ajuste al sitio activo y una menor distancia (3,02 - 3,96Å) entre el S de la Cys29 y el S del ligando que reaccionará covalentemente. Los cálculos cuánticos de optimización de sistemas menores (modelados del sistema completo) evidenciaron la necesidad de que un N del ligando inicialmente se protone a expensas de la His199 para poder ser blanco del ataque nucleofílico del tiolato de la Cys29. En todos los casos se protona el N de R3 (en A un anillo 2-piridil). Estos resultados son una base para la comprensión de las características químicas y estructurales que pueden guiar el modelado y optimización de ligandos derivados de 2-tiopiridina como inhibidores de CatB y otras proteasas. [1] Lecaille, F. et al. Chem. Rev. 2002 102 12:4459-4488. [2] Otto, H. H. & Schirmeister, T. Chem. Rev. 1997 97: 133-171. [3] Programa GOLD: <http://www.ccdc.cam.ac.uk/Solutions/GoldSuite/Pages/GOLD.aspx>

Sistema Nacional de Investigadores

Congreso

Estudio computacional de la especificidad por sustrato de la proteína FTO asociada al riesgo de obesidad , 2011

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* XVIII Simposio Nacional de Química Orgánica;

*Palabras clave:* bioquímica computacional; proteínas; docking

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Bioquímica computacional

- Patricia Saenz Méndez, Maitia Labora, Aline Katz, Oscar N. Ventura. "Estudio computacional de la especificidad por sustrato de la proteína FTO asociada al riesgo de obesidad" XVIII Simposio Nacional de Química Orgánica, 2011, Carlos Paz, República Argentina.

Congreso

Diseño computacional de reacciones multicomponente para la síntesis de productos naturales y farmacéuticos , 2011

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* XVIII Simposio Nacional de Química Orgánica,;

*Palabras clave:* reacciones multicomponente; Química computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

- Eduardo Bermúdez, Oscar N. Ventura, Patricia Saenz Méndez. "Diseño computacional de reacciones multicomponente para la síntesis de productos naturales y farmacéuticos" XVIII Simposio Nacional de Química Orgánica, 2011, Carlos Paz, República Argentina.

Congreso

Diseño computacional de reacciones multicomponente para la síntesis de motivos estructurales recurrentes en productos naturales , 2011

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas – ENAQUI 2011; *Nombre de la institución promotora:* Pedeciba

*Palabras clave:* Química computacional; reacciones multicomponente

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

- Eduardo Bermúdez, Oscar N. Ventura, Patricia Saenz Méndez. "Diseño computacional de reacciones multicomponente para la síntesis de motivos estructurales recurrentes en productos naturales" Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas – ENAQUI 2011, 2011, Montevideo, Uruguay.

Congreso

Análisis de los factores estructurales responsables de la actividad de agentes estabilizadores de microtúbulos (MSAA). Predicción de los sitios de unión de Taxol y de Laulimalida , 2011

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas – ENAQUI 2011; *Nombre de la institución promotora:* Pedeciba

*Palabras clave:* Química computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

- Gastón Pais, Gustavo Seoane, Oscar N. Ventura, Patricia Saenz Méndez. "Análisis de los factores estructurales responsables de la actividad de agentes estabilizadores de microtúbulos (MSAA). Predicción de los sitios de unión de Taxol y de Laulimalida" Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas – ENAQUI 2011, 2011, Montevideo, Uruguay.

Congreso

Estudio computacional de la oxidación de tiolatos con peróxido de hidrógeno como modelo del rol de cisteínas en oxidorreductasas , 2011

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas – ENAQUI 2011; *Nombre de la institución promotora:* Pedeciba

*Palabras clave:* bioquímica computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Bioquímica computacional

- Camila Lacroze, Patricia Saenz Méndez, Oscar N. Ventura. "Estudio computacional de la oxidación de tiolatos con peróxido de hidrógeno como modelo del rol de cisteínas en oxidorreductasas" Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas – ENAQUI 2011, 2011, Montevideo, Uruguay.

Congreso

Insights into the structural basis of microtubule stabilizing antitumoral agents (MSAAs) activity. Prediction of the binding modes of Taxol and Laulimalide , 2011

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* España; *Nombre del evento:* Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011; *Nombre de la institución promotora:* Universidad de Santiago de Compostela

*Palabras clave:* Química computacional; bioquímica computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Bioquímica computacional

- Patricia Saenz Méndez, Gastón Pais, Gustavo Seoane, Oscar N. Ventura. "Insights into the structural basis of microtubule stabilizing antitumoral agents (MSAAs) activity. Prediction of the binding modes of Taxol and Laulimalide" Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011, 2011, Santiago de Compostela, España.

Congreso

Computational study on how protonation changes affect some structural factors of Dehaloperoxidase A , 2011

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* España; *Nombre del evento:* Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011; *Nombre de la institución promotora:* Universidad de Santiago de Compostela

*Palabras clave:* bioquímica computacional; proteínas

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Bioquímica computacional

- Fiorentina Bottinelli, Patricia Saenz Méndez, Oscar N. Ventura. "Computational study on how protonation changes affect some structural factors of Dehaloperoxidase A" Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011, 2011, Santiago de Compostela, España.

Congreso

Determination of chloride, bromide and iodide ions parameters for use in molecular simulations of TIP3P compatible solvated systems with CHARMM27 force field , 2011

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* España; *Nombre del evento:* Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011; *Nombre de la institución promotora:* Universidad de Santiago de Compostela

*Palabras clave:* Química computacional; campos de fuerza

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Bioquímica computacional

- Aline Katz, Patricia Saenz-Méndez, Alexandra Cousido-Siah, Andre Mitschler, Alberto Podjarny, Oscar N. Ventura. "Determination of chloride, bromide and iodide ions parameters for use in molecular simulations of TIP3P compatible solvated systems with CHARMM27 force field" Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011, 2011, Santiago de Compostela, España.

Congreso

Computational study of the lipscomb and lindskog reaction paths for hydrolytic Zn enzymes. , 2011

*Tipo de participación:* Expositor oral,

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* XVI Brazilian Symposium on Theoretical Chemistry; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Brasileira de Química Teórica

*Palabras clave:* Química computacional; enzimas; biomiméticos; bioquímica computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Bioquímica ambiental

Congreso

Estudio teórico del mecanismo de inhibición de cisteína proteasas por derivados de 1,2,4-tiadiazol (1,2,4-TDZ) , 2011

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas – ENAQUI 2011; *Nombre de la institución promotora:* Pedeciba

*Palabras clave:* bioquímica computacional

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Mauricio A. Vega-Tejido;<sup>1</sup> Sarah El Chamy Maluf;<sup>2</sup> Camila Bonturi;<sup>2</sup> Júlio R. Sambrano<sup>2</sup> y Oscar N. Ventura<sup>1</sup> 'Estudio teórico del mecanismo de inhibición de cisteína proteasas por derivados de 1,2,4-tiadiazol (1,2,4-TDZ). Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (ENAQUI 2011), organizado por PEDECIBA-Química, 24 al 26 de octubre de 2011, Torre de las Comunicaciones-ANTEL, Montevideo

Congreso

Estudio teórico de la biosíntesis de la lignina , 2009

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* XVII-Simposio Nacional de Química Orgánica;

*Palabras clave:* Química computacional; lignina

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

- Patricia Saenz Méndez, Oscar N. Ventura. "Estudio teórico de la biosíntesis de la lignina" XVII-Simposio Nacional de Química Orgánica, 2009, Mendoza, República Argentina.

Congreso

Estudio DFT de un mecanismo alternativo de apertura de epóxidos con eterato de trifluoruro de boro para dar syn-fluorohidrininas , 2009

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Colombia; *Nombre del evento:* QUITEL-2009-XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina;

*Palabras clave:* DFT; Química computacional; Físicoquímica orgánica

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

- Patricia Saenz Méndez, Gustavo Seoane, Oscar N. Ventura. "Estudio DFT de un mecanismo alternativo de apertura de epóxidos con eterato de trifluoruro de boro para dar syn-fluorohidrininas" QUITEL-2009-XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, 2009, San Andrés, Colombia.

Congreso

Estudio experimental y computacional de reacciones químicas del ácido peroxocarbónico con subproductos de descomposición de la lignina en CO<sub>2</sub> supercrítico , 2009

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Colombia; *Nombre del evento:* QUITEL-2009-XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina;

*Palabras clave:* Química computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

- Patricia Saenz Méndez, Virginia Aldabalde, Oscar N. Ventura. "Estudio experimental y computacional de reacciones químicas del ácido peroxocarbónico con subproductos de descomposición de la lignina en CO<sub>2</sub> supercrítico" QUITEL-2009-XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, 2009, San Andrés, Colombia.

Congreso

DFT on atmospheric chemistry , 2009

*Tipo de participación:* Expositor oral,

*Referencias adicionales:* Chile; *Nombre del evento:* Latin American School of Materials Science; *Nombre de la institución promotora:* Universidad de Chile

*Palabras clave:* Química computacional; Química atmosférica

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

Congreso

Sarcosina oxidase monomérica, um sistema biológico capaz de evidenciar as diferenças supramoleculares da família dos calcogênios , 2009

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* XV Simpósio Brasileiro de Química Teórica; *Nombre de la institución promotora:* Sociedade Brasileira de Química Teórica

*Palabras clave:* bioquímica computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

VEGA-TEIJIDO MA; VENTURA, O.N.; ZUKERMAN-SCHPECTOR, J. "Sarcosina oxidase monomérica, um sistema biológico capaz de evidenciar as diferenças supramoleculares da família dos calcogênios". In: XV Simpósio Brasileiro de Química Teórica, 2009. Poços de Caldas, MG, Brasil. Livro de Resumos do XV Simpósio Brasileiro de Química Teórica. 2009

Seminario

Molecular Simulations in the South of the World , 2010

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado,

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* Computational Modelling and Simulations of Biological Systems; *Nombre de la institución promotora:* Instituto Pasteur Uruguay

*Palabras clave:* Química computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

## Seminario

Hamiltonians , 2010

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Computational Modelling and Simulations of Biological Systems; *Nombre de la institución promotora:* Instituto Pasteur Uruguay

*Palabras clave:* Química computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

## Simposio

Minería de gran escala: sí, pero... , 2011

*Tipo de participación:* Expositor oral,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 9nas Jornadas Red Temática de Medio Ambiente; *Nombre de la institución promotora:* RETEMA, UDELAR

*Palabras clave:* minería; ambiente

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química ambiental

## Simposio

Modeling and docking studies of 1,2,4-thiadiazole and 2-thiopyridine derivatives in the active site of the cysteine protease cathepsin B , 2011

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* International Symposium "Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions"; *Nombre de la institución promotora:* Udelar - Instituto Pasteur

*Palabras clave:* bioquímica computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Química computacional

VEGA-TEIJIDO, M., EL CHAMY MALUF, S., BONTURI, C., VENTURA, ON, SAMBRANO, JR "Modeling and docking studies of 1,2,4-thiadiazole and 2-thiopyridine derivatives in the active site of the cysteine protease cathepsin B". In: International Symposium "Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions", 2011, Casa Pueblo, Punta Ballena, Maldonado, Uruguay.

## Indicadores de producción

|   |     |
|---|-----|
| <i>Producción bibliográfica</i>                                     | 116 |
| <i>Artículos publicados en revistas científicas</i>                 | 109 |
| Completo (Arbitrada)  | 106 |
| Resumen (Arbitrada)   | 3   |
| <i>Artículos aceptados para publicación en revistas científicas</i> | 0   |
| <i>Trabajos en eventos</i>  | 2   |
| Completo (Arbitrada)  | 1   |
| Resumen (Arbitrada)   | 1   |
| <i>Libros y capítulos de libros publicados</i>                      | 5   |
| Capítulo de libro publicado   | 5   |
| <i>Textos en periódicos</i>   | 0   |
| <i>Documentos de trabajo</i>  | 0   |
| <i>Producción técnica</i>   | 8   |
| <i>Productos tecnológicos</i>                                       | 0   |
| <i>Procesos o técnicas</i>  | 0   |
| <i>Trabajos técnicos</i>  | 2   |
| <i>Otros tipos</i>  | 6   |
| <i>Evaluaciones</i>   | 9   |
| Evaluación de Publicaciones   | 9   |
| <i>Formación de RRHH</i>  | 15  |
| <i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</i>              | 13  |
| Tesis de maestría   | 7   |
| Tesis de doctorado  | 5   |
| Tesis/Monografía de grado   | 1   |
| <i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha</i>               | 2   |
| Tesis de doctorado  | 1   |
| Tesis/Monografía de grado   | 1   |



**Sistema Nacional de Investigadores**

**Sistema Nacional de Investigadores**