



FEDERICO PABLO  
IRIBARNE RESTUCCIA

Dr

[fede@fq.edu.uy](mailto:fede@fq.edu.uy)

Isidoro de María 1614, CC 1  
157, C.P. 11800  
29246682

SNI

Ciencias Naturales y Exactas /  
Ciencias Químicas  
Categorización actual: Nivel  
I (Activo)

Fecha de publicación: 26/07/2023  
Última actualización: 11/12/2022

## Datos Generales

### INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad de la República/ Facultad de Química / Matemática-DETEMA / Uruguay

### DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Universidad de la República / Facultad de Química / Sector Educación Superior/Público

Dirección: Gral. Flores 2124 / 11800

País: Uruguay / Montevideo / Montevideo

Teléfono: (598) 29291558

Correo electrónico/Sitio Web: [fede@fq.edu.uy](mailto:fede@fq.edu.uy)

## Formación

### Formación académica

#### CONCLUIDA

##### DOCTORADO

###### Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (1999 - 2005)

Universidad de la República - Facultad de Química , Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Interacciones moleculares de ligandos nitrofuránicos y fenotiazínicos con las enzimas tripanotona reductasa y glutatión reductasa

Tutor/es: Margot Paulino

Obtención del título: 2005

Áreas de conocimiento:

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

##### MAESTRÍA

###### Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA) (1996 - 1998)

Universidad de la República - Facultad de Química , Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Mecanismo de catálisis enzimática en flavoenzimas relacionadas con la enfermedad de Chagas: transferencia electrónica, diseño de inhibidores selectivos y cálculos de energías libres de unión

Tutor/es: Margot Paulino

Obtención del título: 1999

Áreas de conocimiento:

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

##### GRADO

###### Licenciatura en Bioquímica (1990 - 1995)

Universidad de la República - Facultad de Ciencias , Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Estudio de las proteínas del albumen de huevo mediante el uso de técnicas IMAC

Tutor/es: Prof. Francisco Batista

Obtención del título: 1995

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica de proteínas

### **Licenciatura en Ciencias Biológicas (1990 - 1996)**

Universidad de la República - Facultad de Ciencias , Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Estudio de las proteínas del albumen de huevo mediante el uso de técnicas IMAC

Tutor/es: Francisco Batista

Obtención del título: 1996

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica de proteínas

### **TÉCNICO**

#### **Analista Programador (2001 - 2003)**

Universidad ORT Uruguay - Facultad de Ingeniería , Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa: Analista Programador

Tutor/es: Raúl Gonzalez

Obtención del título: 2003

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Software de despacho y GPS

## Formación complementaria

### **CONCLUIDA**

#### **CURSOS DE CORTA DURACIÓN**

##### **Simulación Molecular usando VMD y NAMD (01/2010 - 01/2010)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
10 horas

Areas de conocimiento:

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

##### **SQL Server 2005 (01/2006 - 01/2006)**

Sector Empresas/Privado / Empresa Privada / Infocorp , Uruguay  
6 horas

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

##### **03 Performance Suite (Datawarehousing) (01/2006 - 01/2006)**

Sector Empresas/Privado / Empresa Privada / Ideasoft , Uruguay  
12 horas

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

##### **Microsoft Windows 2003 (01/2005 - 01/2005)**

Sector Empresas/Privado / Empresa Privada / Infocorp , Uruguay  
4 horas

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

##### **Desarrollador 5 estrellas Microsoft.NET (01/2004 - 01/2004)**

Sector Empresas/Privado / Empresa Privada / Microsoft Uruguay , Uruguay  
80 horas

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

**Introducción a la Bioinformática (01/2003 - 01/2004)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay  
40 horas

Áreas de conocimiento:

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

**Analista Genexus (01/2004 - 01/2004)**

Sector Enseñanza Técnico-Profesional/Secundaria/Privado / Institutos privados de enseñanza técnico profesional / Institutos de idiomas / Estudios de Informática, Uruguay

60 horas

Áreas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

**Mantenimiento de PCs (01/2003 - 01/2003)**

Sector Educación Superior/Privado / Universidad ORT Uruguay / Facultad de Ingeniería, Uruguay  
60 horas

Áreas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

**Host-Parasite Interactions (01/1997 - 01/1997)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay  
16 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de drogas

**Ciencia y Tecnología de la Leche (01/1996 - 01/1996)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Veterinaria, Uruguay

56 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Agrícolas / Ciencias Veterinarias / Ciencias Veterinarias /

**Nociones básicas de Internet (01/1995 - 01/1995)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay  
16 horas

Áreas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

**Dinámica y Mecánica Molecular avanzadas y Gráficos Moleculares (01/1995 - 01/1995)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay  
30 horas

Áreas de conocimiento:

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

**Química Cuántica (01/1995 - 01/1995)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay  
56 horas

Áreas de conocimiento:

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

**Mecánica Cuántica aplicada a las reacciones enzimáticas (01/1995 - 01/1995)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay  
6 horas

Áreas de conocimiento:

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

**Anatomía y Fisiología (01/1995 - 01/1995)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay  
56 horas  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Farmacéutica

**Microbiología Clínica (01/1995 - 01/1995)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay  
56 horas  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Farmacéutica

**Fundamentos Básicos de lenguajes C y AWK (01/1994 - 01/1994)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay  
40 horas  
Áreas de conocimiento:  
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

**Operador Windows (01/1994 - 01/1994)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay  
40 horas  
Áreas de conocimiento:  
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

**Mecánica Cuántica (01/1993 - 01/1993)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay  
56 horas  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

**Sistemas de Computación MS-DOS y UNIX (01/1993 - 01/1993)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay  
56 horas  
Áreas de conocimiento:  
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

**Farmacología Molecular (01/1993 - 01/1993)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay  
56 horas  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Farmacología

**Mecánica y Dinámica Molecular (01/1992 - 01/1992)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química, Uruguay  
56 horas  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática y Modelado Biomolecular

**PARTICIPACIÓN EN EVENTOS****Strengthening teaching and learning in STEM fields (2012)**

Tipo: Seminario  
Institución organizadora: LASPAU-Harvard, Estados Unidos  
Áreas de conocimiento:  
Ingeniería y Tecnología / Otras Ingenierías y Tecnologías / Otras Ingenierías y Tecnologías / Matemáticas

#### **Chagaspace project annual meeting (2004)**

Tipo: Encuentro

Institución organizadora: NASA, Uruguay

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de drogas

#### **XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2002)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: QUITEL, Uruguay

Áreas de conocimiento:

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

#### **1as Jornadas Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular (2002)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: SBBM, Uruguay

Áreas de conocimiento:

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

#### **XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2000)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: QUITEL, Brasil

Áreas de conocimiento:

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

#### **IX Simposio Brasileiro de Química Teórica (1997)**

Tipo: Simposio

Institución organizadora: SBQT, Brasil

Áreas de conocimiento:

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

#### **Molecular, Biochemical and Immunological approaches to parasitic diseases (1994)**

Tipo: Encuentro

Institución organizadora: SAREC, Uruguay

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de drogas

#### **II Congreso Latinoamericano de Ciencias Farmacéuticas del Cono Sur (1993)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Sociedad Uruguaya de Química, Uruguay

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Farmacéutica

## **Idiomas**

### **Inglés**

Entiende muy bien / Habla muy bien / Lee muy bien / Escribe muy bien

### **Francés**

Entiende regular / Habla regular / Lee regular / Escribe regular

## **Áreas de actuación**

### **CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS**

Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática y Modelado Biomolecular

### **INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA**

Nanotecnología /Nano-materiales /Nanotecnología teórica

### **CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS**

Ciencias Químicas /Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /Química Teórica

### **INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA**

Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información /Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones /Análisis de Sistemas

### **INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA**

Otras Ingenierías y Tecnologías /Otras Ingenierías y Tecnologías /Matemáticas

## **Actuación profesional**

### **SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PÚBLICO - UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA - URUGUAY**

Facultad de Química / Matemática-DETEMA

#### **VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

##### **Funcionario/Empleado (11/2015 - a la fecha)** Trabajo relevante

Profesor Agregado 40 horas semanales / Dedicación total  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 4  
Cargo: Efectivo

##### **Funcionario/Empleado (12/2012 - 10/2015)** Trabajo relevante

Profesor Adjunto 40 horas semanales / Dedicación total  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 3  
Cargo: Efectivo

##### **Funcionario/Empleado (04/2009 - 11/2012)**

Profesor Adjunto 40 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 3  
Cargo: Interino

##### **Funcionario/Empleado (12/2005 - 03/2009)**

34 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 3  
Cargo: Interino

##### **Funcionario/Empleado (04/2005 - 11/2005)**

40 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 2  
Cargo: Interino

##### **Becario (09/2002 - 03/2005)**

Chagaspace 40 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 2  
Cargo: Interino

##### **Funcionario/Empleado (10/2001 - 08/2002)**

20 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 2  
Cargo: Interino

**Becario (04/1999 - 03/2002)**

PEDECIBA 40 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 2  
Cargo: Interino

**Becario (11/1996 - 10/1998)**

PEDECIBA 40 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

**Funcionario/Empleado (08/1995 - 10/1996)**

30 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

**Funcionario/Empleado (08/1994 - 07/1995)**

20 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

**Becario (01/1994 - 07/1994)**

20 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

**Colaborador (07/1993 - 12/1993)**

20 horas semanales  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

**ACTIVIDADES****LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN****Diseño racional de inhibidores de enzimas relacionadas con la enfermedad de Chagas (08/1994 - a la fecha )**

Esta línea de investigación busca diseñar e identificar compuestos inhibidores de enzimas relacionadas con el metabolismo oxidativo diferencial de tripanosomatídeos, mediante el uso de técnicas de Modelado Molecular y Bioinformática, con el objetivo de desarrollar fármacos eficaces contra la enfermedad de Chagas y otros males.

10 horas semanales

DETEMA, Laboratorio de Bioinformática y Farmacología molecular , Integrante del equipo

Equipo: M. PAULINO , R. CARRARO

Palabras clave: Chagas diseño de drogas tripanotiona reductasa Trypanosoma cruzi

Áreas de conocimiento:

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

**Estudio de fulerenos y nanotubos (02/2009 - a la fecha )**

Esta línea de investigación se centra en el estudio de la química del grafeno y nanotubos, mediante la concreción de modificaciones a su estructura, utilizando la funcionalización covalente. De esta forma se espera alterar propiedades importantes de estos materiales, los cuales tienen múltiples aplicaciones. A pesar de todos los avances experimentados en este sentido en las últimas décadas, la química del grafeno necesita ser expandida, empleando nuevas reacciones e intentando comprender la ocurrencia de dichas reacciones y aclarar discrepancias entre algunos resultados experimentales reportados.

10 horas semanales

DETEMA, Laboratorio de Nanotecnología Computacional , Integrante del equipo  
Equipo: P. DENIS  
Palabras clave: nanotubos funcionalización y dopamiento grafeno y fullerenos  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Nanotecnología

#### **PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO**

##### **Desarrollo de nanoestructuras derivadas del grafeno para almacenar hidrógeno (10/2012 - a la fecha)**

10 horas semanales  
Grupo de Nanotecnología Computacional  
Investigación  
Integrante del Equipo  
En Marcha  
Financiación:  
Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero  
Equipo: P. DENIS (Responsable)  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Teórica/Nanotecnología

##### **Maestría en Bioinformática (03/2009 - a la fecha)**

5 horas semanales  
Cebioinfo - DETEMA  
Otra  
Integrante del Equipo  
En Marcha  
Financiación:  
Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas, Uruguay, Apoyo financiero  
Equipo: M. PAULINO (Responsable)  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática

##### **ChagaSpace: Structure-based Drug Design and Evaluation of Trypanocidal natural compounds against Chagas Disease (04/2002 - 04/2005 )**

40 horas semanales  
Facultad de Química , Laboratorio de Farmacología y Modelado Biomolecular  
Investigación  
Integrante del Equipo  
Concluido  
Financiación:  
Institución del exterior, Apoyo financiero  
Equipo: A. GARCÍA , E. ALVAREDA , R. CARRARO , M. PAULINO (Responsable)

##### **Network for Research and Training in Parasitic Diseases at the Southern cone of Latin America (12/1997 - 12/2002 )**

30 horas semanales  
Facultad de Química , Química Cuántica  
Investigación  
Concluido  
Financiación:  
Institución del exterior, Apoyo financiero  
Equipo: E. ALVAREDA , R. CARRARO , M. PAULINO (Responsable)

##### **Diseño de medicamentos antichagásicos selectivos (10/1994 - 12/1997 )**

20 horas semanales

Facultad de Química, Cátedra de Química Cuántica

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Equipo: N. HIKICHI, A.O.M. STOPANNI, G. TABARES, M. VEGA, M. HANSZ, O. TAPIA, M. PAULINO (Responsable)

**Theoretical and Experimental Pharmacological Approach to Chagas Disease Specific Action of New Drugs Against Flavoenzyme of the Parasitic Related Organism and the Mammalian Host (10/1992 - 12/1995)**

20 horas semanales

Facultad de Química, Cátedra de Química Cuántica

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: M. PAULINO (Responsable), A.O.M. STOPANNI, TABARES, N. HIKICHI, M. VEGA, M. HANSZ, O. TAPIA

**DIRECCIÓN Y ADMINISTRACIÓN**

**Encargado del área de Matemática (04/2015 - a la fecha)**

Facultad de Química, Matemática

10 horas semanales

**DOCENCIA**

**Química (03/2004 - a la fecha)**

Grado

Responsable

Asignaturas:

Introducción a la Bioinformática, 56 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

**Química (08/2007 - a la fecha)**

Grado

Asistente

Asignaturas:

Bioinformática estructural, 18 horas, Teórico

Areas de conocimiento:

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

**Ingeniería Química (03/2005 - a la fecha)**

Grado

Responsable

Asignaturas:

Álgebra Lineal (Mat03), 80 horas, Teórico-Práctico

Optimización matemática (Mat09), 28 horas, Teórico-Práctico

Ecuaciones diferenciales parciales y series de Fourier (Mat08), 28 horas, Teórico-Práctico

Nivelación, 28 horas, Teórico-Práctico

Matemática 01, 8 horas, Práctico

Matemática 02, 12 horas, Teórico-Práctico

Matemática 07, 14 horas, Teórico

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Otras Ingenierías y Tecnologías / Otras Ingenierías y Tecnologías / Matemáticas

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /

Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /  
Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura / Ecuaciones Diferenciales

**Maestría en Bioinformática (03/2012 - a la fecha)**

Maestría  
Asistente  
Asignaturas:  
Taller de Simulaciones Biomoleculares, 18 horas, Teórico-Práctico  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática y Modelado Biomolecular

**Maestría en Bioinformática (09/2009 - a la fecha)**

Maestría  
Asistente  
Asignaturas:  
Bioinformática II, 20 horas, Teórico-Práctico  
Taller de Simulaciones Biomoleculares, 18 horas, Teórico  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática y Modelado Biomolecular  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

**Química (08/2013 - 11/2013)**

Grado  
Responsable  
Asignaturas:  
Matemáticas ABC, 30 horas, Teórico-Práctico  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura / Pre-Cálculo

**Magister en Química (08/1999 - 12/2006)**

Especialización  
Asistente  
Asignaturas:  
Modelado Biomolecular, 20 horas, Teórico-Práctico

**Magister en Química (08/2002 - 12/2005)**

Especialización  
Asistente  
Asignaturas:  
Estrategias en el diseño de fármacos, 10 horas, Teórico

**Química Farmacéutica (06/2002 - 06/2003)**

Grado  
Invitado  
Asignaturas:  
Biología Molecular, 4 horas, Práctico

**Magister en Química (03/2002 - 07/2002)**

Especialización  
Responsable  
Asignaturas:  
Modelado Molecular I, 40 horas, Teórico-Práctico

**Magister en Química (03/1995 - 12/1998)**

Especialización  
Asistente  
Asignaturas:  
Modelado Molecular II, 20 horas, Práctico

**GESTIÓN ACADÉMICA**

**Evaluación de llamados a cargos de Ayudante y Asistente en Matemáticas (06/2005 - a la fecha )**

DETEMA, Grupo de Matemáticas  
Participación en consejos y comisiones  
Áreas de conocimiento:  
Ingeniería y Tecnología / Otras Ingenierías y Tecnologías / Otras Ingenierías y Tecnologías /  
Matemáticas

**Miembro comisión de reválidas (07/2016 - a la fecha )**

Facultad de Química Participación en consejos y comisiones 2 horas semanales

**Miembro suplente de Comisión de Magister (06/2005 - 03/2006 )**

Facultad de Química  
Participación en consejos y comisiones

**Miembro Titular de la Comisión Directiva del DETEMA (03/2000 - 11/2005 )**

Facultad de Química, Departamento DETEMA  
Otros

**Miembro suplente Comisión Logística (03/2002 - 12/2003 )**

Facultad de Química  
Participación en consejos y comisiones

**SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PÚBLICO - PROGRAMA DE DESARROLLO DE LAS CIENCIAS BÁSICAS - URUGUAY**

Área Química (PEDECIBA) / Facultad de Química

**VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN****Colaborador (01/2005 - a la fecha)** Trabajo relevante

Área Química, Investigador Grado 3. 10 horas semanales / Dedicación total

**SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PRIVADO - UNIVERSIDAD ORT URUGUAY - URUGUAY**

Facultad de Ingeniería

**VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN****Funcionario/Empleado (09/2008 - 06/2011)**

Profesor suplente 2 horas semanales

**ACTIVIDADES****DOCENCIA****Analista de Sistemas (05/2011 - 06/2011 )**

Grado  
Asistente  
Asignaturas:  
Sistemas de Apoyo a la Toma de Decisiones, 3 horas, Teórico

**Analista de Sistemas (04/2009 - 04/2009 )**

Grado  
Asistente  
Asignaturas:  
Sistemas de Apoyo a la toma de decisiones, 3 horas, Teórico

**Analista Programador (09/2008 - 09/2008 )**

Técnico nivel superior

Asistente  
Asignaturas:  
Sistemas de Gestión, 4 horas, Teórico

### **CARGA HORARIA**

Carga horaria de docencia: 15 horas  
Carga horaria de investigación: 10 horas  
Carga horaria de formación RRHH: 10 horas  
Carga horaria de extensión: Sin horas  
Carga horaria de gestión: 20 horas

## **Producción científica/tecnológica**

Desde nuestra incorporación al DETEMA, hemos desarrollado actividades de investigación que, en la actualidad, tienen que ver con dos vertientes distintas:

### 1) Bioinformática estructural

Esta línea tiene que ver con la aplicación de metodologías de cálculo teórico para el discernimiento de la estructura y propiedades asociadas de moléculas biológicas. En nuestro caso, aplicado al estudio de la interacción molecular entre potenciales compuestos farmacológicamente activos y sitios metabólicos blanco de parásitos como el *Trypanosoma cruzi*, agente etiológico de la enfermedad de Chagas.

Se han aplicado métodos de anclaje de ligandos a enzimas, técnicas de simulación de Dinámica Molecular y análisis de relación estructura-actividad (QSAR), para obtener información sobre las características estructurales y electrónicas deseables para el diseño de un inhibidor selectivo de las enzimas parasitarias y para medir la afinidad de los mismos por los sitios de unión. A partir de estos estudios, se han propuesto algunas nuevas estructuras candidatas para la inhibición selectiva, a tiempo que se han identificado aspectos puntuales que estarían determinando la especificidad por los sitios blancos. Como ejemplo de aportes que hemos realizado en esta área, se puede citar la demostración de que la carga neta de los ligandos es un aspecto fundamental en la capacidad de unión al sitio activo enzimático parasitario y la confirmación de que se debe alcanzar un adecuado balance con el tamaño molecular de las especies. Nuestras investigaciones contribuyen a aportar información valiosa para ser utilizada en el denominado diseño racional de drogas. El punto fundamental es que la aplicación de las técnicas descritas nos confiere la capacidad de orientar el trabajo del experimentalista de forma de ahorrar tiempo y dinero en las fases de síntesis de compuestos químicos.

### 2) Nanotecnología computacional

La Nanotecnología computacional tiene que ver con el estudio de las propiedades químicas de nanotubos y derivados, en particular el grafeno, asistido por cálculos computacionales. El grafeno posee propiedades inusuales que atraen gran atención. Sin embargo, el hecho de poseer propiedades extraordinarias no es suficiente y se busca incesantemente la forma de modificar sus características moleculares. En este sentido, la modificación del grafeno mediante la funcionalización covalente es un método poderoso. A pesar de todos los avances verificados, la química del grafeno necesita ser considerablemente expandida empleando nuevas reacciones sin olvidar que se debe comprender por qué las reacciones ya conocidas ocurren y aclarar algunas discrepancias existentes entre los resultados experimentales reportados.

En este contexto, hemos realizado contribuciones importantes en la química del grafeno, a saber: 1) existencia de un efecto cooperativo para la adición de radicales libres que aumenta las energías de enlace a medida que los radicales libres son adicionados de a pares; 2) el azidotrimetilsilano no puede abrir un gap en la estructura electrónica del grafeno en las condiciones sugeridas por algunos estudios experimentales; 3) existencia de un efecto cooperativo para la cicloadición [2+2] de benzinas; 5) los radicales metilo y etilo pueden formar enlaces covalentes con el grafeno mientras que los radicales isopropilo y terbutilo prefieren unirse por adsorción no covalente mediante interacciones de tipo CH- $\pi$ .

## **Producción bibliográfica**

### **ARTÍCULOS PUBLICADOS**

## ARBITRADOS

### **Adsorption of organic molecules on graphene and fluorographene: An unresolved discrepancy between experiment and theory (Completo, 2021)**

F. IRIBARNE , DENIS, P.A.

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 121 10 , p.:26605 2021

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00207608

Scopus<sup>\*</sup>

### **Elucidating the electronic and magnetic properties of epitaxial graphene grown on SiC with a defective buffer layer (Completo, 2021)**

C. Pereyra Huelmo , F. IRIBARNE , DENIS, P.A.

Journal of Materials Science, v.: 56 19 , p.:11386 - 11401, 2021

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00222461

Scopus<sup>\*</sup>

### **On the electronic properties of defective graphene buffer layer on 6H-SiC (0001) (Completo, 2021)**

C. Pereyra Huelmo , F. IRIBARNE , DENIS, P.A.

Computational Condensed Matter, v.: 26 - 538, 2021

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 23522143

Scopus<sup>\*</sup>

### **Reduction chemistry of hexagonal boron nitride sheets and graphene: a comparative study on the effect of alkali atom doping on their chemical reactivity (Completo, 2020)**

DENIS, P.A. , F. IRIBARNE

New Journal of Chemistry, v.: 44 15 , p.:5725 - 5730, 2020

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 11440546

Scopus<sup>\*</sup>

### **In silico and in vitro approach for the understanding of the Xanthine oxidase inhibitory activity of Uruguayan Tannat grape pomace and propolis polyphenols (Completo, 2019)**

F. IRIBARNE , E. ALVAREDA , M. PAULINO ZUNINI , V. ESPINOSA , P. MIRANDA , S. AGUILERA , M. SANTI

Journal of Biophysical Chemistry, v.: 10 p.:1 - 14, 2019

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 2153036

### **Comparative study of the chemical reactivity of graphene and boron nitride sheets (Completo, 2019)**

F. IRIBARNE , DENIS, P.A.

Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1164 p.:11253 2019

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 2210271

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.comptc.2019.112538>

**Cycloaddition reactions on epitaxial graphene (Completo, 2019)**

F. IRIBARNE , DENIS, P.A. , C. PEREYRA

New Journal of Chemistry, v.: 43 p.:11251 - 11257, 2019

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 11440546

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**New approach to accomplish the covalent functionalization of boron nitride nanosheets: Cycloaddition reactions (Completo, 2018)**

F. IRIBARNE , DENIS, P.A.

The Journal of Physical Chemistry, v.: 122 32 , p.:18583 - 18587, 2018

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00223654

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Adsorption of polycyclic aromatic hydrocarbons and inversion barriers of curved conjugated systems inside the molecular cage ExCage6+ (Completo, 2018)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 118 11 , p.:2553 - 2554, 2018

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00207608

DOI: [10.1002/qua.25539](https://doi.org/10.1002/qua.25539)

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Cycloaddition Reactions between Graphene and Fluorinated Maleimides (Completo, 2017)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

The Journal of Physical Chemistry, v.: 121 24 , p.:13218 - 13222, 2017

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00223654

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**On the band gaps and effective masses of mono and dual doped monolayer graphene (Completo, 2017)**

P. DENIS, CLAUDIA PEREYRA, F. IRIBARNE

Computational Materials Science, v.: 137 p.:20 - 29, 2017

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09270256

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Analysis of Cyclosporin A and a Set of Analogs as Inhibitors of a T. cruzi Cyclophilin by Docking and Molecular Dynamics (Completo, 2016)**

R. CARRARO , F. IRIBARNE , M. PAULINO

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 34 2 , p.:399 - 413, 2016

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 07391102

DOI: [10.1080/07391102.2015.1038584](https://doi.org/10.1080/07391102.2015.1038584)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Toward the understanding of the molecular basis for the inhibition of COX-1 and COX-2 by phenolic compounds present in Uruguayan propolis and grape pomace (Completo, 2016)**

M. PAULINO, E. ALVAREDA, F. IRIBARNE, P. MIRANDA, V. ESPINOSA, S. AGUILERA, H. PARDO  
Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 34 12, p.:2643 - 2657, 2016

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 07391102

DOI: [10.1080/07391102.2015.1124808](https://doi.org/10.1080/07391102.2015.1124808)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Dual doped monolayer and bilayer graphene: The case of 4p and 2p elements (Completo, 2016)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

Chemical Physics Letters, v.: 658 p.:152 - 157, 2016

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Bond dissociation energies and enthalpies of formation of flavonoids: A G4 and M06-2X investigation (Completo, 2016)**

E. ALVAREDA, P. DENIS, F. IRIBARNE, M. PAULINO

Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1091 p.:18 - 23, 2016

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 2210271X

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**The effect of the dopant nature on the reactivity, interlayer bonding and electronic properties of dual doped bilayer graphene (Completo, 2016)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 81 35, p.:24693 - 24703, 2016

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 14639076

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Theoretical investigation of the 9,10-bis(1,3-dithiol-2-ylidene)-9,10 dihydroanthracene (exTTF) dimer (Completo, 2015)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

Structural Chemistry, v.: 26 p.:171 - 176, 2015

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 10400400

<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs11224-014-0480-9#page-1>

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Hydrogen Storage in Doped Biphenylene Based Sheets (Completo, 2015)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1062 p.:30 - 35, 2015

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 2210271X

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Strong N-doped Graphene: The Case of 4-(1,3-dimethyl-2,3-dihydro-1 H-benzimidazol-2-yl)phenyl)dimethylamine (N-DMBI) (Completo, 2015)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

The Journal of Physical Chemistry C, v.: 119 27, p.:15103 - 15111, 2015

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 19327447

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Buckycatcher polymer vs. fullerene-buckycatcher complex: which is stronger? (Completo, 2015)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 115 23, p.:1668 - 1672, 2015

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00207608

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Theoretical investigation on the interaction between beryllium, magnesium and calcium with benzene, coronene, circumcoronene and graphene (Completo, 2014)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

Chemical Physics, v.: 430 p.:1 - 6, 2014

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 03010104

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Theoretical characterization of sulfur and nitrogen dual-doped graphene (Completo, 2014)** Trabajo relevante

P. DENIS, C.PEREYRA, F. IRIBARNE

Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1049 p.:13 - 19, 2014

Areas de conocimiento:

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

ISSN: 2210271X

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**A Comparative Study of Defect Reactivity in Graphene (Completo, 2013)** Trabajo relevante

P. DENIS, F. IRIBARNE

The Journal of Physical Chemistry C, v.: 117 p.:19048 - 19055, 2013

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 19327447

**C2V or C6V: Which is the Most Stable Structure of the Benzene-Lithium Complex? (Completo, 2013)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

Chemical Physics Letters, v.: 573 p.:15 - 18, 2013

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Cooperative behavior in functionalized graphene: explaining the occurrence of 1,3 cycloaddition of azomethine ylides onto graphene (Completo, 2012)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

Chemical Physics Letters, v.: 550 p.:111 - 117, 2012

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**A First Principles Study on the Interaction between Alkyl Radicals and Graphene (Completo, 2012)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

Chemistry - A European Journal, v.: 18 24, p.:7568 - 7574, 2012

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09476539

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**[2+2] Cycloadditions onto Graphene (Completo, 2012)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

Journal of Materials Chemistry, v.: 22 12, p.:5470 - 5477, 2012

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09599428

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**How is the stacking interaction of bilayer graphene affected by the presence of defects? (Completo, 2012)**

P. DENIS, R. FACCIO, F. IRIBARNE

Computational and Theoretical Chemistry, v.: 995 p.:1 - 7, 2012

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 2210271X

<http://dx.doi.org/10.1016/j.comptc.2012.06.014>

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Monolayer and Bilayer Graphene Functionalized with Nitrene Radicals (Completo, 2011)** Trabajo relevante

P. DENIS, F. IRIBARNE

The Journal of Physical Chemistry, v.: 115 p.:195 - 203, 2011

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00223654

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **Addition of sulfur radicals to fullerenes (Completo, 2011)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 111 15, p.:4266 - 4275, 2011

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00207608

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **Theoretical Investigation of Carbon Sulfur Triple bonds (Completo, 2011)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

Chemistry - A European Journal, v.: 17 6, p.:1979 - 1987, 2011

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 09476539

DOI: [chem.201002840](https://doi.org/10.1002/chem.201002840)

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chem.201002840/abstract>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **On the applicability of cluster models to study the chemical reactivity of carbon nanotubes (Completo, 2011)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

Journal of Computational Chemistry, v.: 32 11, p.:2397 - 2403, 2011

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01928651

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **The 1,3 dipolar cycloaddition of azomethine ylides o graphene, single wall carbon nanotubes and C60 (Completo, 2010)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 110 p.:1764 - 1771, 2010

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: En prensa

ISSN: 00207608

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **Thiophene Adsorption on Single Wall Carbon Nanotubes and Graphene (Completo, 2010)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

Journal of Molecular Structure THEOCHEM, v.: 957 p.:114 - 119, 2010

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **Phenolic contents and antioxidant activities of Central-southern Uruguayan propolis extracts (Completo, 2010)**

M. PAULINO, 20, S. DE PAULA, I. ELINGOLD, E. ALVAREDA, M. CASANOVA, F. IRIBARNE, S.

AGUILERA MORALES, M. DUBIN

Journal of the Chilean Chemical Society, v.: 55 1 , p.:141 - 146, 2010

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 07179707

WEB OF SCIENCE™  

#### **Hydrogenated double wall carbon nanotubes (Completo, 2009)**

P. DENIS, F. IRIBARNE, R. FACCIO

The Journal of Chemical Physics, v.: 130 19, p.:194704 - 194710, 2009

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00219606

Scopus™ WEB OF SCIENCE™

#### **On the hydrogen addition to graphene (Completo, 2009)**

P. DENIS, F. IRIBARNE

Journal of Molecular Structure THEOCHEM, v.: 907 1-3, p.:93 - 103, 2009

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

Scopus™ WEB OF SCIENCE™

#### **Assaying phenothiazine derivatives as trypanothione reductase and glutathione reductase inhibitors by molecular docking and Molecular Dynamics (Completo, 2009)** Trabajo relevante

F. IRIBARNE, M. PAULINO, S. AGUILERA MORALES, O. TAPIA

Journal of Molecular Graphics and Modelling, v.: 28 p.:371 - 381, 2009

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10933263

Scopus™ WEB OF SCIENCE™

#### **Interaction energies of nitrofurans with trypanothione reductase and glutathione reductase studied by molecular docking (Completo, 2007)**

F. IRIBARNE, M. PAULINO, S. AGUILERA MORALES, H. CERECETTO, M. GONZALEZ, O. TAPIA

Journal of Molecular Structure THEOCHEM, v.: 818 1-3, p.:7 - 22, 2007

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

Scopus™ WEB OF SCIENCE™

#### **The chemotherapy of Chagas disease: An overview (Completo, 2005)** Trabajo relevante

M. PAULINO, F. IRIBARNE, M. DUBIN, O. TAPIA, S. AGUILERA MORALES, A.O.M. STOPANNI

Mini-Reviews in Medicinal Chemistry, v.: 5 p.:499 - 519, 2005

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 13895575

Scopus™ WEB OF SCIENCE™

#### **Computer assisted design of potentially active anti-trypanosomal compounds (Completo, 2002)**

M. PAULINO , F. IRIBARNE , M. HANSZ , M. VEGA , G. SEOANE , H. CERECETTO , R. DI MAIO , I. CARACELLI , J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR , C. OLEA , A.O.M. STOPANNI , M. BASOMBRÍO , M. BERRIMAN , A.H. FAIRLAMB , O. TAPIA

Journal of Molecular Structure THEOCHEM, v.: 584 p.:95 - 105, 2002

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

#### **Docking and molecular dynamics studies at trypanothione reductase and glutathione reductase binding sites (Completo, 2002)**

F. IRIBARNE , M. PAULINO , S. AGUILERA MORALES , M. MURPHY , O. TAPIA

Journal of Molecular Modeling, v.: 5 p.:173 - 183, 2002

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 09485023

Scopus<sup>®</sup>

#### **Hydride transfer transition structure as a possible unifying redox step for describing the branched mechanism of glutathione reductase. Molecular electronic antecedents (Completo, 2000)**

F. IRIBARNE , M. PAULINO , O. TAPIA

Theoretical Chemistry Accounts, v.: 103 6 , p.:451 - 462, 2000

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 1432881X

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

### **PUBLICACIÓN DE TRABAJOS PRESENTADOS EN EVENTOS**

#### **Novel 1,3 cycloadditions of benzyne on epitaxial graphene: A DFT Study (2018)**

F. IRIBARNE , C. PEREYRA

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Hands-on DFT and beyond: Frontiers of advanced electronic structure and molecular dynamics methods

Ciudad: Pekin

Año del evento: 2018

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

#### **Anti-inflammatory Activity of Phenolic Compounds extracted from Uruguayan Propolis and Grape (Vitis Vinifera) Pomace: In Vitro and In Silico Assays (2015)**

E. ALVAREDA , P. MIRANDA , F. IRIBARNE , H. PARDO , M. PAULINO

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: Cuarto Encuentro Nacional de Química (ENAQUI4)

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

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

F. IRIBARNE

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: 10th WATOC Congress

Ciudad: Santiago de Chile

Año del evento: 2014

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática

Medio de divulgación: Papel

**Consenso farmacofórico, QSAR y filtrado virtual para la obtención de nuevos agonistas de receptores nicotínicos de acetilcolina (2011)**

F. IRIBARNE

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Segundo Encuentro de Ciencias Químicas del Uruguay (ENAUQUI)

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2011

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

**In silico studies of sesquiterpene lactones with inhibitory activity of Nuclear Factor kappa B (2010)**

F. IRIBARNE

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: XIII Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2010

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

**Estudio de la capacidad de unión a ciclooxigenasa II y biodistribución de fenoles contenidos en productos naturales (2010)**

F. IRIBARNE

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: XIII Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2010

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

**Measuring binding affinities of pheonthiazines to trypanothione reductase and glutathione reductase by theoretical docking and Molecular Dynamics (2005)**

F. IRIBARNE

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: Annual International Meeting on Membranes and membrane proteins

Ciudad: Dublin

Año del evento: 2005

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

**Estudios de anclaje de compuestos orgánicos adaptables a los sitios de Tripanotona y Glutatión reductasa (2002)**

F. IRIBARNE

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: X Jornadas Uruguayas de la Sociedad de Biociencias

Ciudad: Maldonado

Año del evento: 2002

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

**Estudios de Farmacología Molecular de compuestos bioactivos en tripanosomatídeos (2002)**

F. IRIBARNE

Publicado

Resumen

Evento: Nacional

Descripción: X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Maldonado

Año del evento: 2002

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

**Molecular pharmacology studies on anti-trypanosomal active compounds (2002)**

F. IRIBARNE

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2002

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural

**Estudios de docking de compuestos nitrofuránicos en tripanotona y glutatión reductasas: un análisis gráfico (2002)**

F. IRIBARNE

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2002

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

**Estudio de docking de compuestos fenotiazínicos en tripanotona y glutatión reductasas: un análisis gráfico (2002)**

F. IRIBARNE

Publicado

Resumen  
Evento: Nacional  
Descripción: 1 Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular  
Ciudad: Montevideo  
Año del evento: 2002  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel

**Estudio de docking de derivados fenotiazínicos en los sitios activos de tripanotona reductasa y glutatión reductasa (2001)**

F. IRIBARNE  
Publicado  
Resumen  
Evento: Internacional  
Descripción: XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)  
Ciudad: Toulouse  
Año del evento: 2001  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel

**Estudios de docking y Dinámica Molecular en los sitios de unión de tripanosoma reductasa y glutatión reductasa (2000)**

F. IRIBARNE  
Publicado  
Resumen  
Evento: Internacional  
Descripción: XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)  
Ciudad: Caxambú  
Año del evento: 2000  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel

**Diseño asistido por computadoras de compuestos tripanosomatídeos potencialmente activos (2000)**

F. IRIBARNE  
Publicado  
Resumen  
Evento: Internacional  
Descripción: XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)  
Ciudad: Caxambú  
Año del evento: 2000  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel

**Proton relays at the N-site and G-site of glutathione reductase (1998)**

F. IRIBARNE  
Publicado  
Resumen  
Evento: Internacional  
Descripción: II Congress Quantum systems in Chemistry and Physics  
Ciudad: Granada  
Año del evento: 1998  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural  
Medio de divulgación: Papel

**Structural aspects of specificity in trypanothione and glutathione reductases binding sites and the design of new compounds with potential anti-trypanosomal activity (1997)**

F. IRIBARNE

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: VI Congress on Antiparasitic Chemotherapy

Ciudad: Leuven

Año del evento: 1997

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

**Possible roles of proton relays in the action mechanism of glutathione reductase (1997)**

F. IRIBARNE

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: IX Simposio Brasileiro de Química Teórica (SBQT)

Ciudad: Caxambú

Año del evento: 1997

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

**Structural aspects of specificity in trypanothione and glutathione reductases binding sites and the design of new compounds with potential anti-trypanosomal activity (1997)**

M. PAULINO , F. IRIBARNE , N. HIKICHI , M. HANSZ , M. VEGA , O. TAPIA

Publicado

Completo

Evento: Internacional

Descripción: Technical Report

Ciudad: Uppsala

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Editorial: Uppsala University

Ciudad: Uppsala

Areas de conocimiento:

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

Información y Bioinformática / Bioinformática y Modelado Biomolecular

Medio de divulgación: Papel

**Comparison of glutathione reductase and trypanothione reductase binding sites (1995)**

F. IRIBARNE

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)

Ciudad: Pucón

Año del evento: 1995

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel

**Tripanotona reductasa de Crithidia fasciculata: extracción y determinación de actividad (1993)**

F. IRIBARNE

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: II Congreso Latinoamericano de Ciencias Farmacéuticas del Cono Sur

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 1993

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

#### **Substrate specificity of trypanothione reductase (1993)**

F. IRIBARNE

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: II Congreso Latinoamericano de Ciencias Farmacéuticas del Cono Sur

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 1993

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

#### **Study of the substrate specificity of Trypanothione reductase (1993)**

F. IRIBARNE

Publicado

Resumen

Evento: Internacional

Descripción: VII Simposio Brasileiro de Química Teórica

Ciudad: Caxambú

Año del evento: 1993

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

## **Producción técnica**

## **Otras Producciones**

### **DESARROLLO DE MATERIAL DIDÁCTICO O DE INSTRUCCIÓN**

#### **Apuntes del curso teórico de Matemática 05 (2022)**

F. IRIBARNE , F. Cescato

País: Uruguay

Idioma: Español

Medio divulgación: Internet

Notas de los temas tratados en el curso

#### **Apuntes del curso teórico de Metrología I (2022)**

F. IRIBARNE , F.CESCATO

País: Uruguay

Idioma: Español

Medio divulgación: Internet

Notas de los temas tratados en el curso

#### **Soluciones ejercicios de práctico de Metrología I (2022)**

F. IRIBARNE , M. FERNANDEZ

País: Uruguay

Idioma: Español

Medio divulgación: Internet

Soluciones para los estudiantes

**Soluciones ejercicios de práctico de Matemática 05 (2021)**

F. IRIBARNE , M. FERNANDEZ

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Internet  
Soluciones para los estudiantes

**Soluciones ejercicios de práctico de Matemática 07 (2019)**

F. IRIBARNE , C. Pereyra Huelmo

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Internet  
Soluciones para los estudiantes

**Apuntes del curso teórico de Matemática 07 (2019)**

F. IRIBARNE , C. PEREYRA

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Papel  
Notas de los temas tratados en el curso

**Soluciones ejercicios de práctico de Nivelación (2017)**

F. IRIBARNE , C. Pereyra Huelmo

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Internet  
soluciones para los estudiantes

**Soluciones ejercicios de práctico de Matemática 01 (2017)**

F. IRIBARNE , C. Pereyra Huelmo

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Internet  
soluciones para los estudiantes

**Apuntes del curso teórico de Nivelación (2016)**

F. IRIBARNE

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Papel  
Notas de los temas tratados en el curso

**Apuntes del curso teórico de Matemática 02 (2015)**

F. IRIBARNE

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Internet  
Notas de los temas tratados en el curso

**Soluciones ejercicios de práctico de Matemática 08 (2011)**

F. IRIBARNE

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Internet  
soluciones para los estudiantes

### **Apuntes del curso teórico de Matemática 08 (2011)**

F. IRIBARNE

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Papel  
Notas de los temas tratados en el curso

### **Apuntes del curso teórico de Matemática 09 (2011)**

F. IRIBARNE

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Papel  
Notas de los temas tratados en el curso

### **Soluciones ejercicios de práctico de Matemática 03 (2010)**

F. IRIBARNE

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Internet  
soluciones para los estudiantes

### **Apuntes del curso teórico de Matemática 03 (2010)**

F. IRIBARNE

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Papel  
Notas de los temas tratados en el curso

### **Resolución ejercicios de curso práctico de Matemática 09 (2008)**

F. IRIBARNE

País: Uruguay  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Papel  
Resolución íntegra de ejercicios para estudiantes

## **ORGANIZACIÓN DE EVENTOS**

### **Primer Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (ENAQUI) (2009)**

F. IRIBARNE  
Congreso  
Sub Tipo: Organización  
Lugar: Uruguay ,Montevideo  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Internet  
Duración: 1 semanas  
Institución Promotora/Financiadora: Pedeciba

### **Jornada de Difusión de la investigación del DEQUIFIM vinculada al medio (2005)**

F. IRIBARNE  
Exposición  
Sub Tipo: Organización  
Lugar: Uruguay ,Facultad de Química Montevideo  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Papel  
Duración: 1 semanas  
Institución Promotora/Financiadora: Facultad de Química-DEQUIFIM

### **Tercer Meeting Anual del proyecto ChagaSpace (2004)**

F. IRIBARNE  
Exposición  
Sub Tipo: Organización  
Lugar: Uruguay ,Punta del Este/Monteideo  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Papel  
Duración: 1 semanas  
Evento itinerante: SI  
Institución Promotora/Financiadora: NASA

**XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) (2002)**

F. IRIBARNE  
Congreso  
Sub Tipo: Organización  
Lugar: Uruguay ,Montevideo  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Internet  
Duración: 1 semanas  
Evento itinerante: SI

## Evaluaciones

### EVALUACIÓN DE PROYECTOS

#### COMITÉ EVALUACIÓN DE PROYECTOS

**Comité Técnico del Área Ciencias y Exactas ( 2018 / 2020 )**

Sector Gobierno/Público / Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Agencia Nacional de Investigación e Innovación , Uruguay  
Cantidad: De 5 a 20

#### EVALUACIÓN INDEPENDIENTE DE PROYECTOS

**Fondo Clemente Estable ( 2021 / 2021 )**

Uruguay  
ANII  
Cantidad: Menos de 5

**Fondo María Viñas ( 2021 / 2021 )**

Uruguay  
ANII  
Cantidad: Menos de 5

**Fondo Vaz Ferreira ( 2021 / 2021 )**

Uruguay  
Ministerio de Educación y Cultura  
Cantidad: Menos de 5

**Proyectos de Iniciación a la Investigación ( 2015 )**

Uruguay  
CSIC  
Cantidad: Menos de 5

### EVALUACIÓN DE PUBLICACIONES

#### REVISIONES

**RSC Advances ( 2021 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Medicinal Chemistry ( 2020 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: De 5 a 20

**Letters in Drug Design and Discovery ( 2020 )**

Tipo de publicación: Libros  
Cantidad: Menos de 5

**Current Bioinformatics ( 2018 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**International Journal of Hydrogen Energy ( 2018 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Current Drug Discovery Technologies ( 2017 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: De 5 a 20

**Canadian Journal of Chemistry ( 2015 / 2015 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Indian Journal of Microbiology ( 2014 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Physical Chemistry ( 2012 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**European Journal of Medicinal Chemistry ( 2010 / 2010 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Molecular Modelling ( 2010 / 2010 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: Menos de 5

**Journal of Physical Chemistry Letters ( 2010 )**

Tipo de publicación: Revista  
Cantidad: De 5 a 20

**EVALUACIÓN DE EVENTOS Y CONGRESOS****ENAGUI 6 ( 2019 / 2019 )**

Revisiones  
Uruguay

Pedeciba-Química

**EVALUACIÓN DE CONVOCATORIAS CONCURSABLES****Llamado a Becas de Doctorado ANII ( 2021 / 2021 )**

Evaluación independiente  
Uruguay  
Cantidad: Menos de 5  
ANII

**Fondo Clemente Estable ( 2021 / 2021 )**

Evaluación independiente  
Uruguay  
Cantidad: Menos de 5  
ANII

**Fondo María Viñas ( 2021 / 2021 )**

Evaluación independiente  
Uruguay  
Cantidad: Menos de 5  
ANII

**Fondo Vaz Ferreira ( 2021 / 2021 )**

Evaluación independiente  
Uruguay  
Cantidad: Menos de 5  
Ministerio de Educación y Cultura

**Llamado a Becas de Doctorado CAP ( 2020 / 2020 )**

Evaluación independiente  
Uruguay  
Cantidad: Menos de 5  
CAP

**Vinculación de Científicos y Tecnólogos, ANII ( 2019 / 2019 )**

Evaluación independiente  
Uruguay  
Cantidad: Menos de 5  
ANII

**Fondo Clemente Estable ( 2018 / 2018 )**

Comité evaluador  
Uruguay  
Cantidad: De 5 a 20  
ANII

**Iniciación a la Investigación, Modalidades 1 y 2 ( 2015 / 2015 )**

Evaluación independiente  
Uruguay  
Cantidad: Menos de 5  
CSIC

**Llamados a becas de Magister y Doctorado en Química ( 2001 / 2005 )**

Comité evaluador  
Uruguay  
Cantidad: De 5 a 20  
PEDECIBA-Química

**JURADO DE TESIS**

**Maestría en Bioinformática ( 2014 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Nivel de formación: Maestría

**Posgrado en Química ( 2014 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Nivel de formación: Maestría

**Licenciatura en Química ( 2014 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Nivel de formación: Grado

### **Doctorado en Química ( 2010 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Nivel de formación: Doctorado

## **Formación de RRHH**

### **TUTORÍAS CONCLUIDAS**

#### **POSGRADO**

#### **Modelado y estudio de complejos de Ciclosporina A y compuestos relacionados con una ciclofilina de Trypanosoma cruzi**

Tesis de doctorado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

Nombre del orientado: Roberto Carraro

País: Uruguay

Áreas de conocimiento:

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

#### **OTRAS**

#### **Entrenamiento en técnicas de Modelado Biomolecular**

Otras tutorías/orientaciones

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Tipo de orientación: Asesor

Nombre del orientado: Catalina Guida

País: Uruguay

#### **Entrenamiento en técnicas de Bioinformática Estructural**

Otras tutorías/orientaciones

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Tipo de orientación: Asesor

Nombre del orientado: Loreto Calderón

País: Uruguay

#### **Entrenamiento en técnicas de Bioinformática Estructural**

Otras tutorías/orientaciones

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Tipo de orientación: Asesor

Nombre del orientado: Patricia Caraviglia

País: Uruguay

#### **Entrenamiento en técnicas de Bioinformática Estructural**

Otras tutorías/orientaciones

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Tipo de orientación: Asesor

Nombre del orientado: Elena Alvareda

País: Uruguay

#### **Entrenamiento en técnicas de Bioinformática Estructural**

Otras tutorías/orientaciones

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay

Tipo de orientación: Asesor

Nombre del orientado: Ana García

País: Uruguay

#### **Entrenamiento en técnicas de Bioinformática Estructural**

Otras tutorías/orientaciones  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química , Uruguay  
Tipo de orientación: Asesor  
Nombre del orientado: Patricia Esperón  
País: Uruguay

## TUTORÍAS EN MARCHA

### POSGRADO

#### **Abordaje genómico y proteómico de los mecanismos moleculares de la resistencia al colistin y de la evolución de clones epidémicos de *Klebsiella pneumoniae* multiresistentes (2018)**

Tesis de maestría  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Bioquímica Clínica , Uruguay  
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad  
Nombre del orientado: Camila Cayota  
Medio de divulgación: Papel  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Lineal  
Maestría en Bioinformática

### GRADO

#### **Estudio teórico de la interacción de contaminantes agrícolas adsorbidos en soportes sólidos mediante simulaciones moleculares (2022)**

Tesis/Monografía de grado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Área de tecnologías y ciencias de la naturaleza y el hábitat / Facultad de Química , Uruguay  
Programa: Licenciatura en Química  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Rodrigo Manassi  
País/Idioma: Uruguay,  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

## TUTORÍAS DESISTIDAS

### POSGRADO

#### **Estudio de la vía metabólica de producción de antocianinas en la uva del tannat por medio de métodos de Bioinformática Estructural (2019)**

Tesis de maestría  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Área de tecnologías y ciencias de la naturaleza y el hábitat / Facultad de Química , Uruguay  
Programa: Maestría en Bioinformática  
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad ( F. IRIBARNE , M. PAULINO )  
Nombre del orientado: Andrés Barchi  
País/Idioma: Uruguay,  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

## Otros datos relevantes

### PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS

#### **How is the stacking interaction of bilayer graphene affected by the presence of defects? (2012)**

(Internacional)  
Computational and Theoretical Chemistry

Artículo entre los 5 más descargados del año de la revista, habiéndose publicado en el último trimestre del año

**Investigador Nivel I (2011)**

(Nacional)  
Agencia Nacional de Investigación e Innovación

**Selección de biografía para el Who's Who en Ciencia e Ingeniería (2010)**

(Internacional)  
Marquis Who's who  
Inclusión de biografía personal y profesional para la edición 2011-2012 del libro Who's Who in Science and Engineering.

**On the hydrogen addition to graphene (2010)**

(Internacional)  
Journal of Molecular Structure (TEOCHEM)  
Artículo entre los 3 más descargados del año de la revista TEOCHEM

**Candidato a Investigador (2009)**

Agencia Nacional de Investigación e Innovación

**Hydrogenated Double Wall Carbon Nanotubes (2009)**

(Internacional)  
American Chemical Society and American Institute of Physics  
Artículo seleccionado para destacarse en Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology,

**Investigador Grado 3 (2005)**

(Nacional)  
PEDECIBA-Química

**Beca de Doctorado en Química (1999)**

(Nacional)  
PEDECIBA-Química

**Beca de Maestría en Química (1996)**

(Nacional)  
PEDECIBA-Química

**PRESENTACIONES EN EVENTOS**

**Hands-on DFT and beyond: Frontiers of advanced electronic structure and molecular dynamics methods (2018)**

Otra  
Novel 1,3 cycloadditions of benzyne on epitaxial graphene: A DFT Study  
China  
Tipo de participación: Poster  
Nombre de la institución promotora: Peking University Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,  
Electroquímica / Nanotecnología/Química Teórica

**Cuarto Encuentro de Ciencias Químicas (ENAQUI) (2015)**

Encuentro  
Anti-inflammatory Activity of Phenolic Compounds extracted from Uruguayan Propolis and Grape (Vitis Vinifera) Pomace: In Vitro and In Silico Assays  
Uruguay  
Tipo de participación: Poster  
Nombre de la institución promotora: PEDECIBA-QUÍMICA Areas de conocimiento:

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

#### **10th WATOC Congress (2014)**

Congreso

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

Chile

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 10 Areas de conocimiento:

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

#### **Segundo Encuentro de Ciencias Químicas del Uruguay (ENAQUI) (2011)**

Encuentro

Consenso farmacofórico, QSAR y filtrado virtual para la obtención de nuevos agonistas de receptores nicotínicos de acetilcolina

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Areas de conocimiento:

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

#### **ISCB Latin America (2010)**

Congreso

In silico studies of sesquiterpene lactones with inhibitory activity of nuclear factor kappa B

Uruguay

Tipo de participación: Poster Areas de conocimiento:

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

#### **XIII Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias (2010)**

Congreso

Estudios de la capacidad de unión a ciclooxigenasa II y biodistribución de fenoles contenidos en productos naturales

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: SUB Areas de conocimiento:

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

#### **Annual International Meeting - Membranes and membrane proteins (2005)**

Congreso

Measuring binding affinities of phenothiazines to trypanothione reductase and glutathione reductase by theoretical docking and Molecular Dynamics

Irlanda

Tipo de participación: Poster Areas de conocimiento:

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

#### **Tercer Chagaspace Project Annual Meeting (2004)**

Encuentro

Binding affinities of phenothiazines to trypanothione and glutathione reductase binding sites

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 20

Nombre de la institución promotora: NASA Areas de conocimiento:

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

#### **X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias (2002)**

Congreso

Estudios de Farmacología Molecular de Compuestos Bioactivos en Tripanosomatídeos

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: SUB Areas de conocimiento:

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

#### **X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias (2002)**

Congreso

Estudios de anclaje de compuestos orgánicos adaptables a los sitios de la Tripanotona y Glutati6n Reductasa

Uruguay

Tipo de participaci6n: Poster

Nombre de la instituci6n promotora: SUB Areas de conocimiento:

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

#### **XXVII Congreso de Químicos Te6ricos de Expresi6n Latina (QUITEL) (2002)**

Congreso

Molecular pharmacology studies on anti-trypanosomal active compounds

Uruguay

Tipo de participaci6n: Poster Areas de conocimiento:

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

#### **XXVII Congreso de Químicos Te6ricos de Expresi6n Latina (QUITEL) (2002)**

Congreso

Docking studies of nitrofurán compounds in trypanothione and glutathione reductases active sites: A graphical análisis

Uruguay

Tipo de participaci6n: Poster Areas de conocimiento:

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

#### **1as Jornadas Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular (2002)**

Congreso

Estudios de docking de compuestos fenotiazínicos en tripanotona y glutati6n reductasa: Un análisis gráfico

Uruguay

Tipo de participaci6n: Poster

Nombre de la instituci6n promotora: SBBM Areas de conocimiento:

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

#### **XXVII Congreso de Químicos Te6ricos de Expresi6n Latina (QUITEL) (2001)**

Congreso

Estudio de docking de derivados fenotiazínicos en los sitios activos de tripanotona reductasa y glutati6n reductasa

Francia

Tipo de participaci6n: Poster Areas de conocimiento:

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

#### **XXVI Congreso de Químicos Te6ricos de Expresi6n Latina (QUITEL) (2000)**

Congreso

Estudios de docking y dinámica molecular en los sitios de uni6n de tripanotona reductasa y glutati6n reductasas

Brasil

Tipo de participaci6n: Poster Areas de conocimiento:

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

#### **XXVI Congreso de Químicos Te6ricos de Expresi6n Latina (QUITEL) (2000)**

Congreso

Diseño asistido por computadoras de compuestos tripanosomatídeos potencialmente activos  
Brasil

Tipo de participación: Poster Areas de conocimiento:

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

#### **II Congreso Quantum systems in Chemistry and Physics (1998)**

Congreso

Proton relays at the N-site and G-site of glutathione reductase

España

Tipo de participación: Poster Areas de conocimiento:

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

#### **VI Congress on Antiparasitic chemotherapy, COST/ACRIVAL/IOCD (1997)**

Congreso

Structural aspects of specificity in trypanothione and glutathione reductases binding sites and the  
design of new compounds with potential anti-trypanosomal activity

Bélgica

Tipo de participación: Poster Areas de conocimiento:

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

#### **IX Simpósio Brasileiro de Química Teórica (SBQT) (1997)**

Congreso

Possible roles of proton relays in the action mechanism of glutathione reductase

Brasil

Tipo de participación: Otros Areas de conocimiento:

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

#### **XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (1995)**

Congreso

Comparison of glutathione reductase and trypanothione reductase binding sites

Brasil

Tipo de participación: Poster Areas de conocimiento:

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

#### **II Congreso Latinoamericano de Ciencias Farmacéuticas del Cono Sur (1993)**

Congreso

Substrate specificity of trypanothione reductase

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Farmacia Areas de conocimiento:

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

#### **II Congreso Latinoamericano de Ciencias Farmacéuticas del Cono Sur (1993)**

Congreso

Trypanothione reductase of Crithidia fasciculata: extracción y determinación de actividad

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Farmacia Areas de conocimiento:

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

#### **VII Simposio Brasileiro de Química Teórica (1993)**

Simposio

Study of substrate specificity of Trypanothione reductase

Brasil

Tipo de participación: Poster Areas de conocimiento:

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

## JURADO/INTEGRANTE DE COMISIONES EVALUADORAS DE TRABAJOS ACADÉMICOS

### **Caracterización in silico de dioxigenasas responsables del clivaje de carotenoides de especies de citrus (2021)**

Candidato: Jorge Cantero

Tipo Jurado: Tesis de Maestría

F. IRIBARNE

Posgrado - PEDECIBA / Sector Educación Superior/Público / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Área Química (PEDECIBA) / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

### **Estructura, propiedades, modelado y funcionalidad de semiconductores de óxido de titanio y titanatos modificados para aplicaciones en celdas solares (2020)**

Candidato: Martín Esteves

Tipo Jurado: Tesis de Maestría

F. IRIBARNE

Posgrado - PEDECIBA / Sector Educación Superior/Público / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Área Química (PEDECIBA) / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Además de integrar el tribunal, fui el revisor Pedeciba de los informes.

### **Preparación, caracterización y modelado de nanocompuestos poliméricos para sistemas de almacenamiento de energía (2018)**

Candidato: Fernando Pignanelli

Tipo Jurado: Tesis de Maestría

F. IRIBARNE

Posgrado en Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Además de integrar el tribunal, fui el revisor Pedeciba de los informes.

### **Tamizaje reverso de p-naftoquinonas triapocidas: una estrategia Bioinformática para el descubrimiento de nuevos antichagásicos (2018)**

Candidato: Brenda Vera

Tipo Jurado: Tesis de Maestría

F. IRIBARNE

Posgrado - PEDECIBA / Sector Educación Superior/Público / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Área Química (PEDECIBA) / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

### **Relación Estructura-Actividad de polifenoles. Desarrollo y aplicación de técnicas de Farmacología Molecular y estudios de unión a blancos involucrados en los mecanismos de acción (2016)**

Candidato: Elena Alvareda

Tipo Jurado: Tesis de Doctorado

F. IRIBARNE

Doctorado en Química (orientación Educación en Química) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Además de integrar el tribunal, fui el revisor Pedeciba de los informes.

### **Identificación de los blancos de acción molecular de flavonoides mediante tamizaje virtual en librerías de estructura tridimensional de proteínas (2016)**

Candidato: Diego Carvalho

Tipo Jurado: Tesis de Maestría

F. IRIBARNE

Maestría en Bioinformática (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público /

Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

#### **Preparación, caracterización y simulación de nanocompuestos polianilina grafeno (2016)**

Candidato: Dominique Mombrú  
Tipo Jurado: Pregrado  
F. IRIBARNE  
Licenciado en Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República /  
Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

#### **Desarrollo de moléculas bioactivas mediante metodologías de química verde (2015)**

Candidato: Mariana Ingold  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
F. IRIBARNE  
Doctorado en Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República /  
Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

#### **Nuevos materiales como sistemas para absorción de energía en el infrarrojo (2015)**

Candidato: Benjamín Montenegro  
Tipo Jurado: Tesis/Monografía de grado  
F. IRIBARNE  
Licenciatura en Bioquímica y Licenciatura en Biología / Sector Educación Superior/Público /  
Universidad de la República / Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

#### **Diseño y preparación de nanomateriales carbonosos para spintrónica (2014)**

Candidato: Sebastián Píriz  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
F. IRIBARNE  
Doctorado en Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República /  
Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

#### **Aceleración de cálculos de Dinámica Molecular mediante el uso de GPUs (2014)**

Candidato: Yamandú González  
Tipo Jurado: Tesis de Maestría  
F. IRIBARNE  
Maestría en Bioinformática (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público /  
Universidad de la República / Facultad de Ciencias / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

#### **Caracterización in vivo, in vitro e in silico de una serie de agonistas nicotínicos derivados de citosina (2010)**

Candidato: Andrés Abin  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
F. IRIBARNE  
Doctorado en Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República /  
Facultad de Química / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

#### **CONSTRUCCIÓN INSTITUCIONAL**

Instalación y configuración, junto al Dr. Pablo Denis, de uno de los clusters de computadores más grandes del país (272 procesadores, 2176 GB de RAM y 35 TB de almacenamiento), dedicado al cálculo de

## Información adicional

### Evaluación de informes de tesis

- Evaluador PEDECIBA-Química del segundo informe de avance del Lic. Martín Esteves, correspondiente a la tesis de Doctorado en Química titulada: "Estructura, propiedades, modelado y funcionalidad de semiconductores de óxido de titanio y titanatos modificados para aplicaciones en celdas solares?" (agosto 2022).
- Evaluador PEDECIBA-Química del segundo informe de avance del Lic. Fernando Pignanelli, correspondiente a la tesis de Doctorado en Química titulada: "Preparación caracterización y modelado de nanocompuestos poliméricos para sistemas de almacenamiento de energía?" (noviembre 2020).
- Evaluador PEDECIBA-Química del primer informe de avance del Lic. Martín Esteves, correspondiente a la tesis de posgrado en Química titulada: "Estructura, propiedades, modelado y funcionalidad de semiconductores de óxido de titanio y titanatos modificados para aplicaciones en celdas solares?" (agosto 2020).
- Evaluador PEDECIBA-Química del informe de avance del Lic. Fernando Pignanelli, correspondiente a la tesis de posgrado en Química titulada: "Preparación caracterización y modelado de nanocompuestos poliméricos para sistemas de almacenamiento de energía?" (agosto 2018).
- Evaluador del informe de la Bach. Dominique Mombrú correspondiente a la tesis de grado de la Licenciatura en Química titulada: "Preparación, caracterización y simulación de nanocompuestos polianilina-grafeno?" (marzo de 2017).
- Evaluador PEDECIBA-Química del informe final de la Q. F. Elena Alvareda correspondiente a la tesis de posgrado en Química titulada: "Relación Estructura-Actividad de polifenoles. Desarrollo y aplicación de técnicas de Farmacología Molecular y estudios de unión a blancos involucrados en los mecanismos de acción?" (agosto 2016).
- Evaluador del informe del Bach. Benjamín Montenegro correspondiente a la tesis de grado de la Licenciatura en Química titulada: "Nuevos materiales como sistemas para absorción de energía en el infrarrojo?" (mayo de 2015).
- Evaluador PEDECIBA-Química del informe de Defensa Intermedia de la Q. F. Elena Alvareda correspondiente a la tesis de posgrado en Química titulada: "Relación Estructura-Actividad de polifenoles. Desarrollo y aplicación de técnicas de Farmacología Molecular y estudios de unión a blancos involucrados en los mecanismos de acción?" (agosto 2014).

### Becas de Estudio

- Beca de Doctorado PEDECIBA-Química (1999-2002).
- Beca de investigación de la Universidad Católica del Norte, Antofagasta-Chile (junio 2000).
- Beca de Magister PEDECIBA-Química (1996-1998).
- Beca de investigación de la Universidad Jaume I, Castellón-España (mayo-junio 1997).

### Pasantías y visitas de investigación

- Pasantías de investigación realizadas en el Laboratorio de Bioquímica (Facultad de Química) en los períodos mayo-agosto 1993 y octubre 1994-mayo 1995.
- Pasantía de investigación realizada en el Departamento de Ciencias Experimentales de la Universitat Jaume I, Castelló-España (mayo-junio 1997), financiada por PEDECIBA-Química.
- Pasantía de investigación realizada en el Laboratorio de Cristalografía, Estereodinámica e Modelagem Molecular de la Universidad Federal de Sao Carlos, Sao Paulo-Brasil (julio 1999), financiada por Mercosur.
- Pasantía de investigación realizada en el Laboratorio de Cristalografía Macromolecular, Depto. de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Católica del Norte, Antofagasta-Chile (junio-julio 2000), financiada por PEDECIBA-Química y la Universidad Católica del Norte.
- Visita de investigación al Instituto Manuel Fatale Chabén, Bs. As., Argentina (12-15 noviembre 2002).

### Proyectos de investigación concursados

- "Investigación y desarrollo de fitoterapéuticos nanoencapsulados con múltiples acciones farmacológicas asociadas a las especies reactivas de oxígeno"***. Responsable. Convocatoria Fondos Clemente Estable 2017. No financiado.
- "Tamizaje reverso aplicado al descubrimiento de nuevos blancos farmacológicos de p-naftoquinonas para el desarrollo de medicamentos contra el mal de Chagas?"***. Co-responsable. Convocatoria CSIC I+D 2014. No financiado.
- "Cálculos de energías libres de unión a las enzimas glutatión reductasa y tripanotona reductasā***, CSIC, 1999, seleccionado pero no financiado por falta de fondos. Responsable.
- "Knowledge assisted design and testing of antitrypanosomatid compounds targeted towards the active site of flavoenzymes?"***, TWAS, Research Grant, 2002, seleccionado pero no financiado por falta de

fondos. Responsable.

-?Determinación de motivos estructurales proteicos mediante métodos de Bioinformática?.

Responsable. PDT, 2006. No financiado.

-?Diseño de nanoestructuras híbridas para almacenamiento reversible de hidrógeno?, Fondo Sectorial de Energía, 2009, no seleccionado. Integrante del equipo.

-?Estudio teórico de la adición de radicales centrados en azufre u oxígeno a fulerenos, nanotubos y láminas de grafeno?, Fondo Clemente Estable (ANII), 2010, no seleccionado. Integrante del equipo. Proyectos de docencia concursados

-"Curso Diferencial Análisis I". Responsable. Comisión Sectorial de Enseñanza, 2016. Financiado.

-"Curso Diferencial Análisis I". Responsable. Comisión Sectorial de Enseñanza, 2017. No financiado.

-"Curso Diferencial Análisis I". Responsable. Comisión Sectorial de Enseñanza, 2018. Financiado.

-Curso de Nivelación. Integrante. Comisión Sectorial de Enseñanza, 2021-2022. Financiado

Generación de infraestructura

-Instalación y configuración, junto al Dr. Pablo Denis, de uno de los clusters de computadores más grandes del país (272 procesadores y 2.176 TB de RAM), dedicado al cálculo de estructuras y propiedades en sistemas químicos complejos (Nanotecnología y Química Computacional) (20120142).

Gestión universitaria

-Miembro Suplente de la Comisión Directiva del DETEMA en representación de Docentes Grados 3,4 y 5 (2023-2024).

-Miembro Titular de la Comisión Directiva del DETEMA en representación de Docentes Grados 3,4 y 5 (2019-2022).

-Miembro titular de la Comisión de Reválidas de la Facultad de Química (desde 2016, coordinador desde 2023)

-Integrante del grupo de trabajo sobre la Enseñanza y Rendimiento Estudiantil en Matemáticas, como representante, junto al Ing. Mauricio González, de Facultad de Química (desde julio 2012).

-Integración de Comisiones Asesoras de Méritos en llamados a cargos del DETEMA (Matemáticas, Estadística, Informática, Química Computacional, Bioinformática) (2002 hasta el presente). Más de 40 Comisiones integradas.

-Integrante de la Comisión Organizadora de la re-evaluación de Investigadores de PEDECIBA-Química (2009).

-Miembro Suplente de la Comisión de Magister de Facultad de Química (2005-2006).

-Miembro Titular de la Comisión Directiva del DETEMA en representación de Docentes Grados 1 y 2 (marzo 2003-noviembre 2005).

-Integración de Comisiones evaluadoras de becas de Maestría y Doctorado financiadas por PEDECIBA-Química, en representación de los Estudiantes de posgrado (2002-2004).

-Miembro Titular de la Comisión Directiva del DETEMA en representación de Estudiantes de Posgrado (marzo 2000-febrero 2003).

-Miembro Suplente de la Comisión de Logística de la Facultad de Química (2002).

Extensión universitaria

-Cursos de extensión Dictado del módulo ?Herramientas de Modelado Biomolecular? en las Jornadas de actualización y profundización para docentes de Centros Regionales de Profesores (CERP) (MEMFOD, CODICEN, febrero 2004).

## Indicadores de producción

<b>PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>66</b>
<b>Artículos publicados en revistas científicas</b>	43
Completo	43
<b>Trabajos en eventos</b>	23
<b>Otros tipos</b>	20
<b>PRODUCCIÓN TÉCNICA</b>	<b>20</b>
<b>EVALUACIONES</b>	<b>31</b>
<b>Evaluación de proyectos</b>	5

<b>Evaluación de eventos</b>	1
<b>Evaluación de publicaciones</b>	12
<b>Evaluación de convocatorias concursables</b>	9
<b>Jurado de tesis</b>	4
<b>FORMACIÓN RRHH</b>	<b>10</b>
<b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</b>	7
Tesis de doctorado	1
Otras tutorías/orientaciones	6
<b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha</b>	2
Tesis de maestría	1
Tesis/Monografía de grado	1
<b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones desistidas</b>	1
Tesis de maestría	1