



# Curriculum Vitae

## Matías Rodrigo MACHADO GONZALEZ

Actualizado: 23/06/2017



Publicado: 20/07/2017

**Sistema Nacional de Investigadores**

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas

Categorización actual: Nivel I

Ingreso al SNI: Activo(01/06/2012)

### Datos generales

#### Información de contacto

E-mail: mmachado@pasteur.edu.uy

#### Institución principal

Grupo de Simulaciones Biomoleculares / Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo / Uruguay

#### Dirección institucional

Dirección: Institut Pasteur de Montevideo / Mataojo 2020 / 11400 / Montevideo / Montevideo / Uruguay

Teléfono: (+02) 5220910

E-mail/Web: mmachado@pasteur.edu.uy / www.pasteur.edu.uy

### Formación

#### Formación concluida

##### Formación académica/Titulación

##### Posgrado

2008 - 2012

Doctorado

Doctorado en Ciencias Biológicas (UDELAR-PEDECIBA)

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

Título: Modelado Molecular de Procesos Relacionados a la Transcripción del virus VIH-1

Tutor/es: Sergio Pantano

Obtención del título: 2012

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado Molecular

##### Grado

2001 - 2007

Grado

Licenciatura en Bioquímica

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

Título: Monografía: "Células Dendríticas –Origen, Subtipos y Función-" Trabajo experimental: "Caracterización de antígenos de Echinococcus granulosus mediante una visión integrada de varios enfoques"

Tutor/es: Dras. Sylvia Dematteis y Verónica Fernández

Obtención del título: 2007

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

#### Formación en marcha

##### Formación académica/Titulación

## Posgrado

2009  
Maestría  
Maestría en Bioinformática  
Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay  
*Tutor/es:* Sergio Pantano  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

## Grado

2001  
Grado  
Licenciatura en Ciencias Biológicas  
Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biología Marina, Limnología

## Formación complementaria

### Cursos corta duración

4 / 2013 - 4 / 2013  
Bioinformática estructural e análisis do proteoma  
Escola Brasileiro - Argentina de Biotecnologia , Brasil  
*Palabras clave:* Bioinformática; Proteómica  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

10 / 2011 - 10 / 2011  
Coarse-grained Simulation of Biological Soft Matter Systems using ESPResSo  
Universität Stuttgart , Alemania  
*Palabras clave:* Modelado molecular  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Modelado y Simulaciones Moleculares

10 / 2011 - 10 / 2011  
Coarse-Grained Biomolecular Modeling  
Ecole Polytechnique Federale de Lausanne , Suiza  
*Palabras clave:* Modelado molecular  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Modelado y Simulaciones Moleculares

03 / 2011 - 03 / 2011  
Course Molecular Biology of Viral Diseases  
Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Virología

10 / 2009 - 10 / 2009  
Latin American Postgraduate Program of Biophysics  
Sociedad Brasileira de Biofísica , Brasil  
*Palabras clave:* Biofísica general  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

2007 - 2007  
Introducción a la programación de aplicaciones bioinformáticas en Bash  
Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática

2006 - 2006  
Evaluación en el aula universitaria: diseño de instrumentos  
Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

2005 - 2005  
Introducción a la Docencia Universitaria-Programa de Formación Docente  
Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

2003 - 2003  
Química de la Atmósfera y Polución (UdEP)  
Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente / Meteorología y Ciencias Atmosféricas / Química Atmosférica

## Otras instancias

2008	<p>Seminarios</p> <p><i>Nombre del evento:</i> Training Course: Molecular Design and Computer-assisted Combinatorial Chemistry</p> <p><i>Institución organizadora:</i> International Centre for Science and High Technology-UNIDO (ICS-UNIDO) , Italia</p> <p><i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Diseño 'in silico' de Farmacos</p>
2008	<p>Congresos</p> <p><i>Nombre del evento:</i> Conference on Modeling and Computation of Structure and Dynamics of Condensed Phase Systems</p> <p><i>Institución organizadora:</i> Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati di Trieste (SISSA) , Italia</p> <p><i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Modelado y Simulaciones Moleculares</p>
2008	<p>Congresos</p> <p><i>Nombre del evento:</i> Conference on Knots and other Entanglements in Biopolymers: Topological and Geometrical Aspects of DNA, RNA and Protein Structures</p> <p><i>Institución organizadora:</i> International Centre for Theoretical Physics (ICTP) , Italia</p> <p><i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Estructura de Macromoléculas</p>
2006	<p>Simposios</p> <p><i>Nombre del evento:</i> Eighth Giambiagi Winter School-Part A</p> <p><i>Institución organizadora:</i> Universidad de Buenos Aires , Argentina</p> <p><i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado Molecular y Química Teórica</p>
2008	<p>Talleres</p> <p><i>Nombre del evento:</i> Advanced School in High Performance and GRID Computing</p> <p><i>Institución organizadora:</i> International Centre for Theoretical Physics (ICTP) , Italia</p> <p><i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Programación</p>
2010	<p>Otros</p> <p><i>Nombre del evento:</i> Curso: Creación y Gestión de Empresas</p> <p><i>Institución organizadora:</i> Camara Nacional de Comercio y Servicios del Uruguay , Uruguay</p> <p><i>Palabras clave:</i> Emprendedurismo; Empresa</p> <p><i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Sociales / Economía y Negocios / Negocios y Administración</p>
2008	<p>Otros</p> <p><i>Nombre del evento:</i> Pasantía experimental 'Exploring the Interaction between HP1-Suv39'</p> <p><i>Institución organizadora:</i> International Centre for Genetic Engineering and Biotechnology (ICGEB) , Italia</p> <p><i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares</p>
2008	<p>Otros</p> <p><i>Nombre del evento:</i> Pasantía de siete meses en el área Pure and applied chemistry del International Centre for Science and High Technology</p> <p><i>Institución organizadora:</i> International Centre for Science and High Technology-UNIDO (ICS-UNIDO) , Italia</p> <p><i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado Molecular</p>
2003	<p>Otros</p> <p><i>Nombre del evento:</i> Pasantía honoraria 'Análisis de los efectos del entorno sobre el mecanismo de la reacción de transformación de etanolamina en acetaldehído y amoníaco en condiciones de protonación parcial y total'</p> <p><i>Institución organizadora:</i> LQTC - IQB - Facultad de Ciencias , Uruguay</p>
2003	<p>Otros</p> <p><i>Nombre del evento:</i> Estudio de reacciones radicalarias, catalizadas por el cofactor vitamina B12 dentro del sitio activo de la Etanolamina amonio liasa</p> <p><i>Institución organizadora:</i> LQTC - IQB - Facultad de Ciencias 2003 al 2008 , Uruguay</p>

## Construcción institucional

Participo activamente en comisiones, reuniones de consejo y actividades de índole institucional. Además busco de forma pro-activa generar vínculos de colaboración para el desarrollo de trabajos conjuntos entre distintos grupos de la institución.

## Idiomas

Español

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

Inglés

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

## Areas de actuación

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

## Actuación Profesional

### Cargos desempeñados actualmente

Desde: 09/2014

Postdoctorando , (40 horas semanales) , Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay

Desde: 03/2014

Investigador Grado 3 , (40 horas semanales) , Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas , Uruguay

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

#### Vínculos con la institución

07/2004 - 12/2004, *Vínculo:* Ayudante, Docente Grado 1 Interino, (20 horas semanales)

05/2005 - 05/2008, *Vínculo:* Ayudante, Docente Grado 1 Interino, (20 horas semanales)

06/2010 - 05/2012, *Vínculo:* Claustriista por Orden Egresados, No docente (1 horas semanales)

#### Actividades

06/2003 - 04/2008

Líneas de Investigación , Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Teórica Computacional

Estudio de reacciones radicalarias catalizadas por el cofactor vitamina B12 dentro del sitio activo de la Etanolamina amonio liasa , Integrante del Equipo

07/2004 - 12/2007

Docencia , Grado

Físicoquímica II– Modulo Estructura y Propiedades (Físicoquímica Moderna Molecular) , Licenciatura en Bioquímica

03/2005 - 06/2007

Docencia , Especialización

Curso Taller de Química Computacional , Licenciatura en Bioquímica

06/2006 - 04/2008

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Teórica Computacional

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

### Institut Pasteur de Montevideo , Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay

#### Vínculos con la institución

*02/2008 - 09/2014, Vínculo: Investigador Asistente, (40 horas semanales)*

*09/2014 - Actual, Vínculo: Postdoctorando, (40 horas semanales)*

#### Actividades

02/2010 - Actual

Líneas de Investigación , Laboratorio de Biosimulaciones , Laboratorio de Biosimulaciones

Desarrollo y aplicación de modelos de grano grueso para la simulación de sistemas biológicos , Integrante del Equipo

02/2008 - 10/2012

Líneas de Investigación , Institut Pasteur de Montevideo , Grupo de Simulaciones Biomoleculares

Dissecting the repression/activation of HIV-1 transcription: Study of the intrinsic flexibility of HP1 proteins , Integrante del

Equipo

10/2016 - 10/2016

Docencia , Especialización

Introduction to multiscale molecular dynamics simulations , Responsable , Ingeniería en Bioinformática (Universidad de Talca)

05/2016 - 05/2016

Docencia , Especialización

Molecular dynamics simulations with SIRAH force field , Invitado , III CCES Workshop & SAIMS, Universidade Estadual de Campinas (Brasil)

11/2015 - 11/2015

Docencia , Especialización

Molecular dynamics simulations with SIRAH force field , Responsable , Ingeniería en Bioinformática (Universidad de Talca)

05/2015 - 05/2015

Docencia , Especialización

OpenLab: Performing Molecular Simulations with SIRAH force field , Organizador/Coordinador , FOCEM

11/2013 - 11/2013

Docencia , Especialización

Introduction to Structural Biology and Bioinformatics , Organizador/Coordinador , FOCEM

09/2013 - 09/2013

Docencia , Especialización

International Seminar Germany-Chile: From Plant Biology to Computational Chemistry and Molecular Bioinformatics , Invitado , Ingeniería en Bioinformática (Universidad de Talca)

09/2011 - 10/2011

Docencia , Especialización

Hands-on Course: Coarse Grain Methods for Biomolecular Simulations , Organizador/Coordinador , AMSUD Pasteur

02/2010 - 03/2010

Docencia , Especialización

Computational Modelling and Simulations of Biological Systems , Organizador/Coordinador , AMSUD Pasteur

10/2016 - 10/2016

Extensión

Jornada de Puertas Abiertas Institut Pasteur Montevideo

07/2016 - 07/2016

Extensión

Taller en liceo Manuel Rosé de Las Piedras

05/2016 - 05/2016

Extensión

2 Talleres en la Semana de la Ciencia y la Tecnología

10/2015 - 10/2015

Extensión

Jornada de Puertas Abiertas Institut Pasteur Montevideo

10/2014 - 10/2014

Extensión

Jornada de Puertas Abiertas Institut Pasteur Montevideo

02/2016 - Actual

Gestión Académica

Delegado de Ayudantes en Consejo de Investigadores

05/2016 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Universidad de Talca (Chile) , Centro de Bioinformática y Simulación Molecular

Use and improvement of the SIRAH force field for Coarse-Grained Simulations applied to intermolecular interactions of proteins , Integrante del Equipo

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores

06/2009 - 05/2011

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Institut Pasteur de Montevideo , Grupo de Simulaciones Biomoleculares  
Caracterización Estructural de Procesos de Transcripción Viral del VIH-1 , Integrante del Equipo

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

### Vínculos con la institución

03/2014 - Actual, *Vínculo:* Investigador Grado 3, (40 horas semanales)

### Actividades

08/2014 - 10/2014

Docencia , Maestría

Introducción al análisis estructural y funcional de proteínas , Organizador/Coordinador

### Lineas de investigación

*Título:* Desarrollo y aplicación de modelos de grano grueso para la simulación de sistemas biológicos

*Tipo de participación:* Integrante del Equipo

*Equipos:* Sergio Pantano(Integrante)

*Palabras clave:* SIRAH force field

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

*Título:* Dissecting the repression/activation of HIV-1 transcription: Study of the intrinsic flexibility of HP1 proteins

*Tipo de participación:* Integrante del Equipo

*Equipos:* Sergio Pantano(Integrante)

*Palabras clave:* simulaciones; modelizacion; docking

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

*Título:* Estudio de reacciones radicalarias catalizadas por el cofactor vitamina B12 dentro del sitio activo de la Etanolamina amonio liasa

*Tipo de participación:* Integrante del Equipo

*Equipos:* E. Laura Coitiño(Integrante)

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

### Proyectos

2016 - Actual

*Título:* Use and improvement of the SIRAH force field for Coarse-Grained Simulations applied to intermolecular interactions of proteins,

*Tipo de participación:* Integrante del Equipo,

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:*

*Equipo:* Sergio Pantano(Integrante); Jans Alzate-Morales(Responsable); Julio Miguel Caballero(Integrante); Daniela Cáceres(Integrante); Fabián González(Integrante); Gabriel Olguin(Integrante); Janneth González(Integrante); Nelson Patricio Barrera(Integrante); Daniela González-Norambuena(Integrante); Pedro Luis De la Torre(Integrante)

*Financiadores:* Comisión Nacional de Investigación Científica y Tecnológica / Apoyo financiero

Institut Pasteur de Montevideo / Cooperación

Pontificia Universidad Javeriana - Bogotá / Cooperación

Pontificia Universidad Católica de Chile / Cooperación

Univ de Talca / Cooperación

*Palabras clave:* modelos de grano grueso; SIRAH force field

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

2006 - 2008

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

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 4(Pregrado), 1(Doctorado)

*Equipo:* Leonardo Darré(Integrante); Gustavo Mourglia(Integrante); E. Laura Coitiño(Responsable); Alicia Merlino(Integrante)

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

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

2009 - 2011

*Título:* Caracterización Estructural de Procesos de Transcripción Viral del VIH-1, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo,

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 2(Maestría/Magister), 3(Doctorado)

*Equipo:* Leonardo Darré(Integrante); Sergio Pantano(Responsable); Pablo Dans(Integrante); Fernando Herrera(Integrante)

*Financiadores:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Simulación de Biomoléculas

## Sistema Nacional de Investigadores

### Producción científica/tecnológica

Mi trabajo se centra en el modelado molecular de procesos biológicos. Como centro de estudio están las proteínas y los ácidos nucleicos. El modelado teórico es actualmente una herramienta muy potente y complementaria al trabajo experimental. El incremento en poder de cálculo ha permitido alcanzar el estudio de procesos en escalas de interés biológico, brindando detalles que de otro modo no podrían ser alcanzados. El objetivo de mi trabajo es el uso e implementación de modelos en simulaciones que permitan aumentar nuestra comprensión sobre el mundo molecular que nos rodea.

### Producción bibliográfica

#### Artículos publicados

#### Arbitrados

Completo

M. BERRERA; N. SURDO; A. KOSCHINSKI; M. BRESCIA; M. MACHADO; C. CARR; S. MOROTTI; E. GRANDI; P. WRIGHT; D. BERS; J. GORELIK; S. PANTANO; M. ZACCOLO

FRET biosensor uncovers cAMP nano-domains at beta-adrenergic targets that dictate precise tuning of cardiac contractility. *Nature Communications*, 2017

*Palabras clave:* Biosensor Fluorescente; cAMP

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

*Medio de divulgación:* Internet ; ISSN: 20411723 ; DOI: 10.1038/ncomms15031

<http://www.nature.com/ncomms/>



SCOPUS



Completo

M. MACHADO; S. PANTANO

SIRAH Tools: mapping, backmapping and visualization of coarse-grained models. *Bioinformatics (Oxford, England)*, v.: 32, p.: 1568 - 1570, 2016

*Palabras clave:* SIRAH force field; Toolkit; Coarse-grained

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y simulación molecular

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

Bioinformática

ISSN: 13674803 ; DOI: 10.1093/bioinformatics/btw020

<http://bioinformatics.oxfordjournals.org>

M. MACHADO es autor de correspondencia



SCOPUS





Completo

F. TRAJTENBERG; J. A. IMELIO; M. MACHADO; N. LARRIEUX; M. A. MARTI; G. OBAL; A. E. MECHALY; A. BUSCHIAZZO

Regulation of signaling directionality revealed by 3D snapshots of a kinase:regulator complex in action. *eLife*, 2016

*Palabras clave:* Sistemas dos componentes; señalización celular

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biología Celular, Microbiología

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

*Medio de divulgación:* Internet ; ISSN: 2050084X ; DOI: 10.7554/eLife.21422

<https://elifesciences.org>



SCOPUS



Completo

M. MACHADO; L. DARRÉ; A. BRANDNER; H. GONZALEZ; S. FERREIRA; S. PANTANO

SIRAH: a structurally unbiased coarse-grained force field for proteins with aqueous solvation and long-range electrostatics. *Journal of Chemical Theory and Computation*, v.: 11, p.: 723 - 739, 2015

*Palabras clave:* Coarse-grained methods

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

ISSN: 15499618 ; DOI: 10.1021/ct5007746

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

Sistema Nacional de Investigadores

Primer autor compartido con Leonardo Darré



SCOPUS



Completo

D. PRIETO; G. APARICIO; M. MACHADO; F. ZOLESSI

Application of the DNA-Specific Stain Methyl Green in the Fluorescent Labeling of Embryos. *Journal of Visualized Experiments*, v.: 99, 2015

*Palabras clave:* Fluorescent Labeling

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Métodos de Investigación en Bioquímica

*Medio de divulgación:* Otros ; ISSN: 1940087X ; DOI: 10.3791/52769

<http://www.jove.com/>

SCOPUS



Completo

M. MACHADO; S. PANTANO

Exploring the LacI-DNA dynamics by multiscale simulations using the SIRAH force field. *Journal of Chemical Theory and Computation*, v.: 11 10, p.: 5012 - 5023, 2015

*Palabras clave:* SIRAH force field; Proteína represora del operon lac

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

ISSN: 15499618 ; DOI: 10.1021/acs.jctc.5b00575

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

Sistema Nacional de Investigadores

M. MACHADO es autor de correspondencia



SCOPUS



Completo

P. DANS; L. DARRÉ; M. MACHADO; A. ZEIDA; AF. BRANDNER; S. PANTANO

Assessing the accuracy of the SIRAH force field to model DNA at coarse grain level. *Lecture Notes in Computer Science*, v.: 8213, p.: 71 - 81, 2013

*Palabras clave:* Molecular Simulation; Coarse-grained methods; DNA; SIRAH force field

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

*Medio de divulgación:* Otros ; ISSN: 03029743 ; DOI: 10.1007/978-3-319-02624-4\_7

SCOPUS





Completo

L. DARRÉ; M. MACHADO; S. PANTANO

Coarse grained models of water. WILEY Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science, v.: 2, p.: 921 - 930, 2012

*Palabras clave:* Coarse-grained methods; Water models; Modelado molecular

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Modelado y Simulaciones Moleculares

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 17590884 ; DOI: 10.1002/wcms.1097

<http://wires.wiley.com/WileyCDA/>

SCOPUS



Completo

A. ZEIDA; M. MACHADO; P. DANS; S. PANTANO

Breathing, bubbling and bending: DNA flexibility from multimicrosecond simulations. Physical Review E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, v.: 86, p.: 021903, 2012

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Modelado y Simulaciones Moleculares

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 15393755 ; DOI: 10.1103/PhysRevE.86.021903

<http://pre.aps.org/>



Sistema Nacional de Investigadores

SCOPUS



Completo

M. MACHADO; P. DANS; S. PANTANO

A hybrid all-atom/coarse grain model for multiscale simulations of DNA. Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 13, p.: 18134 - 18144, 2011

*Palabras clave:* ADN; Simulación molecular; Modelos multiescala; SIRAH force field

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

ISSN: 14639076 ; DOI: 10.1039/c1cp21248f



SCOPUS



Completo

M. MACHADO; P. DANS; S. PANTANO

Isoform-specific determinants in the HP1 binding to histone 3: insights from molecular simulations.. Amino Acids, v.: 5, p.: 1571 - 1581, 2010

*Palabras clave:* Epigenetics; HIV-1; Transcription; Phosphorylation; Methylation

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 09394451 ; DOI: 10.1007/s00726-009-0371-3

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



SCOPUS



Sistema Nacional de Investigadores

Completo

P. DANS; A. ZEIDA; M. MACHADO; S. PANTANO

A coarse grained model for atomic-detailed DNA simulations with explicit electrostatics. Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 6, p.: 1711 - 1725, 2010

*Palabras clave:* SIRAH force field

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 15499618 ; DOI: 10.1021/ct900653p

[www.pubs.acs.org](http://www.pubs.acs.org)



SCOPUS



Completo

L. DARRÉ; M. MACHADO; P. DANS; F. HERRERA; S. PANTANO

Another coarse-grain model for aqueous solvation: WAT four?. *Journal of Chemical Theory and Computation*, v.: 6, p.: 3793 - 3807, 2010

*Palabras clave:* SIRAH force field

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 15499618 ; DOI: 10.1021/ct100379f

<http://pubs.acs.org>



## Artículos aceptados

### Libros

Libro publicado , Otra

E. L. COITIÑO; P. DANS; V. LEONE; A. CASTRO; M. MACHADO; A. SANABRIA

Bioinformática estructural Visualización y diseño asistido por PC de la estructura 3D de moléculas y macromoléculas. 2007.

*Editorial:* Edición DIRAC - Facultad de Ciencias , Montevideo

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

*Medio de divulgación:* Papel;

### Capitulos de Libro

Capítulo de libro publicado

M. MACHADO; S. PANTANO

Structure-Based, In Silico Approaches for the Development of Novel cAMP FRET Reporters , 2015

*Libro:* cAMP Signaling. v.: 1294, p.: 41 - 58,

*Editorial:* Springer New York

*Palabras clave:* Fluorescent protein; Allosteric mechanism; CNBD; Rational design; Protein engineering

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Métodos de Investigación en Bioquímica

*Medio de divulgación:* Internet; ISSN/ISBN: 9781493925377;

<http://link.springer.com/book/10.1007%2F978-1-4939-2537-7>

### Trabajos en eventos

Resumen

M. MACHADO; J. VISO; M. COSTABEL; S. PANTANO

Affordable viral particle's simulations on desktop computers using SIRAH force field , 2016

*Evento:* Internacional, XLV Reunión Anual SAB, Tucuman , 2016

*Palabras clave:* modelos de grano grueso

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Virología

*Medio de divulgación:* Otros;

Institut Pasteur de Montevideo / Apoyo financiero; Sociedad Argentina de Biofísica / Otra

<http://biofísica.org.ar/reunion2016>

Resumen

M. MACHADO; S. PANTANO; P. DANS

DNA allostery: Atomistic insights into the signal transduction mechanisms , 2014

*Evento:* Internacional , Latin American Summit Meeting on Biological Crystallography and Complementary Methods , Campinas , 2014

*Palabras clave:* DNA allostery; Molecular dynamics simulation; Coarse-grained methods; SIRAH force field

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

*Medio de divulgación:* Otros;

<http://pages.cnpem.br/iycr2014-lasummit/>

Resumen

M. MACHADO; S. PANTANO

Integrative modeling of HIV-1 provirus: From knowledge to structure , 2013

*Evento:* Internacional , 30 years of HIV science: Imagine the future , Paris , 2013

*Palabras clave:* HIV; Molecular Modeling; Structural Biology

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Modelado y Simulaciones Moleculares

*Medio de divulgación:* Otros;

<http://www.30yearshiv.org/>

## Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. MACHADO; S. PANTANO

Multiscale simulations: mixing SIRAH and AMBER force fields to explore the LacI-DNA dynamics , 2013

*Evento:* Regional , 4to. Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (4CAB2C) y 4ta. Conferencia Internacional de la Sociedad Iberoamericana de Bioinformática (SolBio) , Rosario, Argentina , 2013

*Palabras clave:* Lac Operon; Multiscale modelling

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

*Medio de divulgación:* Otros;

<http://congreso4a2b2c.cifasis-conicet.gov.ar/>

Resumen

G. MORATORIO; S. BIANCHI; L. TOME; G. RAMA; G. OBAL; F. CARRION; M. MACHADO; S. PANTANO; J. CRISTINA; O. PRITSCH

Analysis of a complete genomic sequence of BLV strain obtained from a lymphosarcoma , 2011

*Evento:* Internacional , 15th International Conference on Human Retrovirology, HTLV and related viruses , 2011

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

*Medio de divulgación:* Otros;

<http://www.htlv.net/>

Resumen

M. MACHADO; S. PANTANO

Isoform specificity factors ruling the HP1-histone H3 interaction , 2010

*Evento:* Regional , Primer Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional , Quilmes (Argentina) , 2010

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Dinamica Molecular de Proteínas

*Medio de divulgación:* Otros;

<http://www.a2b2c.org.ar/>

Resumen

A. ZEIDA; P. DANS; M. MACHADO; S. PANTANO

Improving the performance of our coarse-grain model for dna simulations , 2010

*Evento:* Regional , Primer Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional , Quilmes (Argentina) , 2010

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

*Medio de divulgación:* Otros;

<http://www.a2b2c.org.ar/>

Resumen

M. MACHADO; P. DANS; L. DARRÉ; S. PANTANO

3D scaled model of HIV-1 transcriptional machinery , 2010

*Evento:* Internacional , Workshop CeBEM | 3rd Latin American Protein Society Meeting , Salta (Argentina) , 2010

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

*Medio de divulgación:* Papel;

[www.laproteinsociety.org](http://www.laproteinsociety.org)

Resumen

M. MACHADO; S. PANTANO

A systematic docking approach to study protein-protein interactions , 2009

*Evento:* Internacional , VII Iberoamerican congress of biophysics , Buzios (Brasil)

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

*Medio de divulgación:* Papel;

[www.sbbf.org.br/congresso2009/](http://www.sbbf.org.br/congresso2009/)

Resumen

M. MACHADO; S. PANTANO; V. FRECER; S. MIERTUS

In silico design of anti HIV-1 compounds inhibiting human protein-protein interactions. , 2008

*Evento:* Internacional , Workshop: Human RNA Viruses , Trieste (Italia) , 2008

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

*Medio de divulgación:* Papel;

[www.icgeb.org](http://www.icgeb.org)

Resumen

L. DARRÉ; M. MACHADO; E. L. COITIÑO

Characterizing D-[Ru(bpy)2dppz]2+ DNA probe intercalative behaviour at GG, GC and CG steps. , 2008

*Evento:* Internacional , Conference: Drug Design and Discovery for Developing Countries , Trieste (Italia) , 2008

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

*Medio de divulgación:* Papel;

[www.ics.trieste.it](http://www.ics.trieste.it)

Resumen

M. MACHADO; S. PANTANO; V. FRECER; S. MIERTUS

Theoretical approach to depict the HP1g - Suv39H1 interaction. Looking for a new target against HIV-1 infection. , 2008

*Evento:* Internacional , Conference: Drug Design and Discovery for Developing Countries , Trieste (Italia) , 2008

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

*Medio de divulgación:* Papel;

[www.ics.trieste.it](http://www.ics.trieste.it)

Resumen

P. DANS; M. MACHADO; S. PANTANO

Development of a coarse-grained model of DNA and bulk water to tackle the simulation of DNA-drug interactions at the mesoscopic scale. , 2008

*Evento:* Internacional , Conference: Drug Design and Discovery for Developing Countries , Trieste (Italia) , 2008

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

*Medio de divulgación:* Papel;

[www.ics.trieste.it](http://www.ics.trieste.it)

Resumen expandido

M. MACHADO; S. PANTANO

Structural Characterization of a new target against HIV-1 using theoretical methods , 2008

*Evento:* Internacional , Conference: Drug Design and Discovery for Developing Countries , Trieste (Italia) , 2008

*Palabras clave:* HIV-1 Tat; molecular dynamics; modelling; drug resistance; Bromodomain

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

*Medio de divulgación:* Internet;

[www.ics.trieste.it](http://www.ics.trieste.it)

Resumen

S. SIGNORELLI; N. PUIG; M. MACHADO; E. L. COITIÑO

Tunneling and kinetic isotopic effects at the first step in the reaction catalized by ethanolamine ammonia-lyase and B12. , 2007

*Evento:* Internacional , XXXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL33) , La Habana (Cuba) , 2007

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

*Medio de divulgación:* Papel;

<http://karin.fq.uh.cu/quitel33>

Resumen

M. MACHADO; L. DARRÉ; E. L. COITIÑO

Sequence Dependent D-[Ru(bpy)2dppz]2+ DNA Complex Dynamical Behavior. , 2007

*Evento:* Internacional , 6th International Conferences of Biological Physics & 5th Southern Cone Biophysics Congress , Montevideo (Uruguay) , 2007

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

*Medio de divulgación:* Papel;

<http://www.icbp2007.org.uy>

Resumen

L. DARRÉ; M. MACHADO; E. L. COITIÑO

Modelado de la interacción del complejo [Ru(bpy)2dppz]2+ en un dodecamero de ADN: geometrías de intercalación y efectos sobre la estructura macromolecular. , 2006

*Evento:* Nacional , V Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular , Montevideo (Uruguay) , 2006

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. MACHADO; E. L. COITIÑO

One enzyme, one step in the catalyzed reaction mechanism and a continuum model to represent different local mediums at play. , 2006

*Evento:* Internacional , Workshop Research trends in clusters, biomolecules and materials , Buenos Aires (Argentina) , 2006

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

*Medio de divulgación:* Papel;

[http://www.giambiagi.df.uba.ar/old\\_/2006/A/workshop.htm](http://www.giambiagi.df.uba.ar/old_/2006/A/workshop.htm)

Resumen

M. MACHADO; E. L. COITIÑO

Modelling the medium's effect over a step in the reaction catalysed by the enzyme Ethanolamine ammonia lyase. , 2005

*Evento:* Internacional , XXXIV Reunión Anual de la Sociedad Brasileira de Biología y Bioquímica Molecular (SBBq) , Aguas da Lindota (Brasil) , 2005

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

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

M. MACHADO; E. L. COITIÑO

Efectos del entorno sobre la barrera y reorganización en la migración 1,2-NH3 del sustrato del sistema etanolamina amonio liasa-B12. , 2004

*Evento:* Nacional , III Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular , Montevideo (Uruguay) , 2004

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

*Medio de divulgación:* Papel;

## Producción técnica

### Productos

*Software , Obra*

S. PANTANO; M. MACHADO; A BRANDNER; H GONZALEZ; L. DARRÉ; P. DANS; A. ZEIDA

*The SIRAH force field 2014 , Campo de fuerza para simulación de biomoléculas mediante modelos de grano grueso , 2014*

*Aplicación:* SI , Investigación académica

### Patente ó Registro

*Derecho de Autor*

020086 , *The SIRAH force field 2014*

*Fechas:* Deposito: 07/11/2014; Examen: 00/00/0000; Concesión: 00/00/0000

*Patente nacional:* SI

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

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

<http://www.sirahff.com>

## Formación de RRHH

### Tutorías concluidas

#### Otras

Otras tutorías/orientaciones

Use and improvement of the SIRAH force field for Coarse-Grained Simulations applied to intermolecular interactions of proteins , 2016

*Tipo de orientación:* Cotutor en pie de igualdad

*Nombre del orientado:* Gabriel Olguín

Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay

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

*Pais/Idioma:* Chile/Español

*Información adicional:* Pasantía de 1 mes en el Laboratorio de Biosimulaciones del institut Pasteur de Montevideo realizada en el marco del 'Programa de cooperación internacional a Proyectos de apoyo a la formación de redes internacionales entre centros de Investigación' financiada por CONICYT (Chile) en coordinación con el Centro de Bioinformática de la Universidad de Talca

Otras tutorías/orientaciones

Use and improvement of the SIRAH force field for Coarse-Grained Simulations applied to intermolecular interactions of proteins , 2016

*Tipo de orientación:* Cotutor en pie de igualdad

*Nombre del orientado:* Fabián Gonzalez

Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay

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

*Pais/Idioma:* Chile/Español

*Información adicional:* Pasantía de 1 mes en el Laboratorio de Biosimulaciones del Institut Pasteur de Montevideo realizada en el marco del 'Programa de cooperación internacional a Proyectos de apoyo a la formación de redes internacionales entre centros de Investigación' financiada por CONICYT (Chile) en coordinación con el Centro de Bioinformática de la Universidad de Talca

Otras tutorías/orientaciones

Searching for novel drug targets against Dengue and Zika by molecular modeling and dynamic simulation of full viral particles , 2016

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Benoît Malye

SIGMA Clermont , Francia

*Palabras clave:* modelos de grano grueso

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Virología

*País/Idioma:* Francia/Inglés

*Información adicional:* Pasantía de 3 meses en el Laboratorio de Biosimulaciones del Institut Pasteur de Montevideo financiada por la fundación Pierre Ledoux Jeunesse Internationale (Francia)

## Tutorías en marcha

### Posgrado

# Sistema Nacional de Investigadores

Tesis de maestría

Desarrollo in silico de sensores fluorescentes para diseccionar vías de señalización celular , 2016

*Tipo de orientación:* Cotutor en pie de igualdad

*Nombre del orientado:* Florencia Klein

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Magister en Química

*Palabras clave:* Biosensor Fluorescente; SIRAH force field

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

*País/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Proyecto financiado con beca ANII de apoyo a la formación de posgrados

## Otros datos relevantes

### Premios y títulos

2004 Premio a mejor póster sección 3 III Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular

2009 Beca de Posgrado (Maestría) (Nacional) Agencia Nacional de Investigación e Innovación

Beca para el desarrollo de estudios de Maestría (2009-2010)

2011 Beca de finalización de estudios de posgrado (Doctorado) (Nacional) CSIC-UdeLaR

Beca de 12 meses para la finalización de los estudios de Doctorado (2011-2012).

2012 Investigador nivel candidato del Sistema Nacional de Investigadores (Nacional) Agencia Nacional de Investigación e Innovación

2013 Posdoctorado (Nacional) Institut Pasteur de Montevideo

### Presentaciones en eventos

Congreso

Multiscale simulations of Dengue and Zika viral particles , 2016

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 30

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Integrative methods in Structural Biology to enhance high impact research in health and disease; *Nombre de la institución promotora:* Institut Pasteur de Montevideo & British Council

*Palabras clave:* modelos de grano grueso; Simulación molecular

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Virología

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares



Congreso

Multiscale simulations of Dengue and Zika viral particles , 2016

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

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* III-CCES Workshop & SAIMS; *Nombre de la institución promotora:* Universidade Estadual de Campinas

*Palabras clave:* modelos de grano grueso; SIRAH force field

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

Congreso

Affordable viral particle's simulations on desktop computers using SIRAH force field , 2016

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 24

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* XLV Reunión Anual SAB; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Argentina de Biofísica

*Palabras clave:* modelos de grano grueso; SIRAH force field

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

Congreso

DNA allostery: Atomistic insights into the signal transduction mechanisms , 2014

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 30

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* Latin American Summit Meeting on Biological Crystallography and Complementary Methods; *Nombre de la institución promotora:* National Center for Research in Material and Energy (CNPEM), Campinas-SP

*Palabras clave:* Biología Estructural; Cristalografía

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Biología Estructural

Congreso

Integrative modeling of HIV-1 provirus: From knowledge to structure , 2013

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Francia; *Nombre del evento:* 30 years of HIV science: Imagine the future; *Nombre de la institución promotora:* Institut Pasteur

*Palabras clave:* HIV-1; Genome; Molecular Modeling

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

Congreso

Multiscale simulations: mixing SIRAH and AMBER force fields to explore the LacI-DNA dynamics , 2013

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* 4to. Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (4CAB2C) y 4ta. Conferencia Internacional de la Sociedad Iberoamericana de Bioinformática (SolBio); *Nombre de la institución promotora:* A2B2C y SolBio

*Palabras clave:* Lac Operon; Multiscale modelling

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

Congreso

Cross talk between DNA and transcription factors , 2012

*Tipo de participación:* Expositor oral,

*Referencias adicionales:* Chile; *Nombre del evento:* ISCB Latin America Conference on Bioinformatics.; *Nombre de la institución promotora:* ISCB - International Society for Computational Biology

*Palabras clave:* Factores de transcripción; Secuencias promotoras; Simulación molecular; Modelos simplificados

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Modelado y Simulaciones Moleculares

Congreso

Modeling the macromolecular assembly of the HIV-1 provirus , 2012

*Tipo de participación:* Expositor oral,

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* 3rd ICGB Workshop on Human RNA Viruses; *Nombre de la institución promotora:* ICGB - International Center for Genetic Engineering and Biotechnology

*Palabras clave:* HIV-1; Modelado molecular

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Modelado y Simulaciones Moleculares

Congreso

Plug and play model to perform multiscale simulations with DNA , 2011

*Tipo de participación:* Expositor oral,

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* Segundo Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional; *Nombre de la institución promotora:* Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional

*Palabras clave:* ADN; Simulación molecular; Modelos simplificados

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Simulación de Biomoléculas

Primer autor

Congreso

Isoform specificity factors ruling the HP1-histone H3 interaction , 2010

*Tipo de participación:* Expositor oral,

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* Primer Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional; *Nombre de la institución promotora:* Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

Primer autor

Congreso

Improving the performance of our coarse-grain model for dna simulations , 2010

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* Primer Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional; *Nombre de la institución promotora:* Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional

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

Coautor del Póster

Congreso

3D scaled model of HIV-1 transcriptional machinery , 2010

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* Workshop CeBEM | 3rd Latin American Protein Society Meeting; *Nombre de la institución promotora:* LAPSM; SAB; CeBEM

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Simulación de Biomoléculas

Primer autor

Congreso

A systematic docking approach to study protein-protein interactions , 2009

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* VII Iberoamerican Congress of Biophysics;

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Estructura de Macromoléculas

Primer autor

Congreso

Development of a coarse-grained model of DNA and bulk water to tackle the simulation of DNA-drug interactions at the mesoscopic scale , 2008

*Tipo de participación:* Otros,

*Referencias adicionales:* Italia; *Nombre del evento:* Drug Design and Discovery for Developing Countries, Trieste; *Nombre de la institución promotora:* ICS-UNIDO

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

Coautor del Póster

Congreso

Theoretical approach to depict the HP1g-Suv39H1 interaction. Looking for a new target against HIV-1 infection , 2008

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Italia; *Nombre del evento:* Drug Design and Discovery for Developing Countries, Trieste; *Nombre de la institución promotora:* ICS-UNIDO

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

Primer autor

Congreso

Characterizing D-[Ru(bpy)2dppz]2+ DNA probe intercalative behaviour at GG, GC and CG steps , 2008

*Tipo de participación:* Expositor,

*Referencias adicionales:* Italia; *Nombre del evento:* Drug Design and Discovery for Developing Countries, Trieste; *Nombre de la institución promotora:* ICS-UNIDO

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

Póster

Congreso

In silico design of anti HIV-1 compounds inhibiting human protein-protein interactions , 2008

*Tipo de participación:* Expositor oral,

*Referencias adicionales:* Italia; *Nombre del evento:* Workshop: Human RNA Viruses; *Nombre de la institución promotora:* The International Center for Genetic Engineering and Biotechnology (ICGEB)

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

Presentación Oral (15min)

Congreso

Tunneling and kinetic isotopic effects at the first step in the reaction catalyzed by ethanolamine ammonia-lyase and B12 , 2007

*Tipo de participación:* Expositor oral,

*Referencias adicionales:* Cuba; *Nombre del evento:* XXXIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL33);

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

Coautor del trabajo, no expositor.

Congreso

Modelado de la interacción del complejo [Ru(bpy)<sub>2</sub>dppz]<sup>2+</sup> en un dodecamero de ADN: geometrías de intercalación y efectos sobre la estructura macromolecular , 2006

*Tipo de participación:* Otros,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* V Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular (SBBM)

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

Coautor del Póster

Congreso

Modelling the medium's effect over a step in the reaction catalysed by the enzyme Ethanolamine ammonia lyase , 2005

*Tipo de participación:* Expositor,

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* XXXIV Reunión Anual de la Sociedad Brasileira de Biología y Bioquímica Molecular; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Brasileira de Biología y Bioquímica Molecular (SBBq)

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

Póster y Presentación Oral (15min)

Congreso

Efectos del entorno sobre la barrera y reorganización en la migración 1,2-NH<sub>3</sub> del sustrato del sistema etanolamina amonio liasa-B12 , 2004

*Tipo de participación:* Expositor,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* III Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular (SBBM)

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

Póster

Seminario

Estructura y dinámica de la hidratación alrededor de interruptores moleculares de luz: el caso del complejo Ru(bpy)<sub>2</sub>(dppz)<sup>2+</sup> , 2007

*Tipo de participación:* Expositor,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Ciclo de Seminarios del Instituto de Química Biológica; *Nombre de la institución promotora:* Instituto de Química Biológica, FCien

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

Presentación Oral (15min)

Seminario

Trabajando en la actualización del profesorado en la enseñanza de conceptos vinculados a la estructura molecular apoyados por herramientas computacionales para su visualización y diseño en 3D , 2005

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 2º Seminario - Taller "La Enseñanza de las Ciencias y el ingreso a la Universidad"; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Ciencias , Uruguay

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

Autores: E. Laura Coitiño, Pablo Dans, Vanessa Leone, Alexandra Castro & Matías Machado

## Simposio

SIRAH package: Features and Perspectives , 2015

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Chile; *Nombre del evento:* iCBSM (First International Conference In Bioinformatics, Simulations And Modeling);

*Nombre de la institución promotora:* Universidad de Talca, Chile

*Palabras clave:* modelos de grano grueso; Simulación molecular

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado y Simulaciones Moleculares

## Simposio

Tackling Silencing-Activation of HIV-1 Transcription , 2011

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

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Molecular Biology of Viral Diseases; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Ciencias - UdelaR

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Virología

## Primer autor

### Taller

Pushing forward multiscale simulations of DNA , 2011

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Suiza; *Nombre del evento:* Coarse-Grained Biomolecular Modeling; *Nombre de la institución promotora:* Centre Européen de Calcul Atomique et Moléculaire

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Ácidos Nucleicos

## Primer autor

### Taller

One enzyme, one step in the catalyzed reaction mechanism and a continuum model to represent different local mediums at play , 2006

*Tipo de participación:* Expositor,

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* Research trends in clusters, biomolecules and materials;

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

### Póster

## Encuentro

Educando en Química de la Atmósfera y Polución: Experiencias Universitarias Presenciales y a Distancia, Reflexiones y Propuestas , 2006

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 1º Encuentro Nacional de Educación Ambiental para el desarrollo humano sustentable; *Nombre de la institución promotora:* Red Nacional de Educación Ambiental para el Desarrollo Humano Sustentable

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General

Autores: Matías Machado, Pablo Dans & E. Laura Coitiño

## Otra

Sequence Dependent D-[Ru(bpy)<sub>2</sub>dppz]<sup>2+</sup>-DNA Complex Dynamical Behavior , 2007

*Tipo de participación:* Otros,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 6th International Conferences of Biological Physics & 5th Southern Cone Biophysics Congress;

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

Coautor del Poster

## Indicadores de producción

<i>Producción bibliográfica</i>	35
<i>Artículos publicados en revistas científicas</i>	13
Completo (Arbitrada)	13
<i>Artículos aceptados para publicación en revistas científicas</i>	0
<i>Trabajos en eventos</i>	20
Resumen (No Arbitrada)	19
Resumen expandido (No Arbitrada)	1
<i>Libros y capítulos de libros publicados</i>	2
Libro publicado	1
Capítulo de libro publicado	1

<i>Textos en periódicos</i>	<i>0</i>
<i>Documentos de trabajo</i>	<i>0</i>
<i>Producción técnica</i>	<i>1</i>
<i>Productos tecnológicos</i>	<i>1</i>
Con registro o patente	1
<i>Procesos o técnicas</i>	<i>0</i>
<i>Trabajos técnicos</i>	<i>0</i>
<i>Otros tipos</i>	<i>0</i>
<i>Evaluaciones</i>	<i>0</i>
<i>Formación de RRHH</i>	<i>4</i>
<i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</i>	<i>3</i>
Otras tutorías/orientaciones	3
<i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha</i>	<i>1</i>
Tesis de maestría	1

## Sistema Nacional de Investigadores

## Sistema Nacional de Investigadores