



ARI FERNANDO ZEIDA  
CAMACHO

Licenciado en Bioquímica

[zeidaari@gmail.com](mailto:zeidaari@gmail.com)  
[https://www.researchgate.net/profile/Ari\\_Zeida](https://www.researchgate.net/profile/Ari_Zeida)

### SNI

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

Fecha de publicación: 04/04/2024  
Última actualización: 03/04/2024

## Datos Generales

### INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad de la República/ Facultad de Medicina / Departamento de Bioquímica - Centro de Investigaciones Biomédicas (Ceinbio) / Uruguay

### DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Universidad de la República / Facultad de Medicina / Sector Educación Superior/Público / Departamento de Bioquímica - Centro de Investigaciones Biomédicas (Ceinbio)

Dirección: Avda Gral Flores 2125 / 11800

País: Uruguay / Montevideo / Montevideo

Teléfono: (+5411) 29243414

Correo electrónico/Sitio Web: [azeida@fmed.edu.uy](mailto:azeida@fmed.edu.uy) <https://www.ceinbio.edu.uy/>

## Formación

### Formación académica

#### CONCLUIDA

#### DOCTORADO

##### Ciencias Químicas (2011 - 2015)

Universidad de Buenos Aires , Argentina

Título de la disertación/tesis/defensa: Estructura y mecanismo de acción de peroxirredoxinas: estudio teórico y experimental

Obtención del título: 2015

Sitio web de la disertación/tesis/defensa: [http://digital.bl.fcen.uba.ar/gsdl-282/cgi-bin/library.cgi?a=d&c=tesis&d=Tesis\\_5877\\_ZeidaCamacho](http://digital.bl.fcen.uba.ar/gsdl-282/cgi-bin/library.cgi?a=d&c=tesis&d=Tesis_5877_ZeidaCamacho)

Financiación:

Consejo de Investigaciones Científicas y Técnicas , Argentina

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

#### GRADO

##### Licenciatura en Bioquímica (2006 - 2011)

Universidad de la República - Facultad de Ciencias , Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa:

Obtención del título: 2011

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

##### Profesorado de Matemática (2000 - 2004)

Administración Nacional de Educación Pública - Centro Regional de Profesores , Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa:

Obtención del título: 2004

Palabras Clave: Matemática

Áreas de conocimiento:

Humanidades / Otras Humanidades / Otras Humanidades /

### Formación complementaria

## POSDOCTORADOS

### **Mecanismo catalítico de las metionina sulfóxidoreductasas de *Mycobacterium tuberculosis* y su interacción con oxidantes celulares (2017 - 2019)**

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Medicina / Departamento de Bioquímica y CEINBIO , Uruguay

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Agencia Nacional de Investigación e Innovación , Uruguay

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

### **Caracterización funcional, estructural y dinámica de la peroxidasa Peroxirredoxina Q de *Mycobacterium tuberculosis* (2016 - 2017)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad de Buenos Aires , Argentina

Financiación:

CONICET , Argentina

Areas de conocimiento:

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

## CURSOS DE CORTA DURACIÓN

### **Laboratorio de comunicación científica (05/2019 - 05/2019)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera / Centro de Formación de la Cooperación Española , Uruguay

16 horas

Palabras Clave: Comunicación científica Divulgación

Areas de conocimiento:

Ciencias Sociales / Comunicación y Medios / Comunicación y Medios / Comunicación científica

### **IUBMB/IUPAB Advanced School and Workshop "Protein-Protein and Protein-Membrane Interaction: Experimental and Theoretical Approaches" (10/2018 - 10/2018)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Biología. Universidad de La Habana , Cuba

45 horas

Palabras Clave: Protein-Protein Interaction; Protein Biophysics

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

### **Modern Approaches in Drug Discovery for Neglected Infectious Diseases (01/2014 - 01/2014)**

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay

40 horas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biología Estructural

### **Herramientas teóricas y experimentales para el estudio de la interacción entre biomoléculas (01/2013 - 01/2013)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Farmacia y Bioquímica , Argentina

90 horas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

### **Coarse Grain Methods for Biomolecular Simulations (01/2011 - 01/2011)**

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

### **Redox Chemistry and Biology of Thiols (01/2011 - 01/2011)**

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut

Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay  
90 horas  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /

**Theoretical / Practical Course on Molecular Simulations and Design (01/2010 - 01/2010)**

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay  
90 horas  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

## Idiomas

**Inglés**

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

## Areas de actuación

**CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS**

Otras Ciencias Naturales /Otras Ciencias Naturales /Bioquímica

**CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS**

Ciencias Biológicas /Biofísica

**CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS**

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

## Actuación profesional

**SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/REDES INTERNACIONALES - REDES INTERNACIONALES - URUGUAY**

Centro de Biología Estructural del MERCOSUR

### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

**Colaborador (06/2021 - a la fecha)**

Miembro Comité Ejecutivo

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

Facultad de Medicina / Departamento de Bioquímica - Centro de Investigaciones Biomédicas (Ceinbio)

### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

**Funcionario/Empleado (11/2019 - a la fecha)** Trabajo relevante

Profesor Adjunto Contratado 48 horas semanales / Dedicación total  
Contrato equiparado con G3 DT  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 3  
Cargo: Interino

## ACTIVIDADES

**PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO**

Bases moleculares y celulares de la regulación del metabolismo oxidativo mediada por la aconitasa

#### **mitocondrial (ACO2). (03/2020 - a la fecha)**

La aconitasa mitocondrial (ACO2) es una enzima monomérica esencial del ciclo de los ácidos tricarboxílicos que cataliza la isomerización reversible del citrato a isocitrato. Si bien no es considerada una enzima reguladora del ciclo, su inhibición impacta en el flujo de metabolitos del ciclo, en la relación citrato/isocitrato, síntesis de ATP y formación de especies reactivas del oxígeno mitocondrial como ha mostrado nuestro y otros grupos. Contiene en su sitio activo un particular centro ferrosulfurado  $[4Fe^2+4S]^{2+}$  que no participa en reacciones redox y es altamente sensible a oxidantes biológicos. Cuando se oxida el centro FeS resulta en una enzima inactiva. Se han detectado modificaciones post-traduccionales (PTM) en aminoácidos de la proteína algunas oxidativas y otras relacionadas a cambios en metabolitos o señales celulares. La significancia estructural y funcional de estas modificaciones no ha sido totalmente dilucidada. Se ha postulado que la ACO2 interacciona con otras proteínas mitocondriales como la frataxina e incluso forma parte de los nucleoides al interactuar con el ADNmt. Estas funciones han sido cuestionadas o poco estudiadas para ACO2 de mamífero. En este proyecto utilizado la ACO2 recombinante humana (hACO2), clonada y purificada por nosotros, buscamos dilucidar a nivel molecular cuáles son los cambios estructurales determinantes de las funciones de la ACO y cómo las PTM impactan en la estructura y función de la ACO2. Para ello se realizará una caracterización bioquímica/biofísica de la proteína in vitro, que será acompañada por simulaciones de dinámica molecular de la misma. Se realizarán estudios para dilucidar si hay interacción entre la hACO2 y la frataxina así como entre la ACO2 y el ADNmt. También planteamos identificar las PTM de la ACO2 en fibroblastos humanos senescentes, modelo que presenta aumento de la producción de ROS mitocondriales y dónde encontramos la ACO2 inhibida. Proponemos también modificar los niveles de expresión de la ACO2 en cultivos celulares para caracterizar los cambios metabólicos acontecidos. Los modelos celulares permitirán determinar además los distintos niveles de regulación que puede ejercer la ACO2, es decir cambios en la actividad por modificación del centro FeS, por PTM en los aminoácidos o en la expresión de la proteína.

2 horas semanales

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado: 1

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: CASTRO, L. ; Castro, L.A. , TÓRTORA, V. , Mansilla, S. , A. ZEIDA , INÉS MARMISOLLE , Javier Adrian DUTRA MOYA

#### **Reducción de hidroperóxidos de ácidos grasos por peroxirredoxina 3 humana: estudios en enzima recombinante aislada y en un modelo celular. (03/2021 - a la fecha)**

Las peroxirredoxinas (Prxs), una familia de peroxidases dependiente de tioles, juegan roles importantes en el sensado y transducción de señales derivadas de hidroperóxidos. La Prx3, exclusivamente mitocondrial, está involucrada en procesos fisiológicos y patológicos, incluyendo participación en la homeostasis de glucosa y desarrollo de cáncer. La enzima reduce la mayor parte del peróxido de hidrógeno producido en mitocondria. Si bien se han relacionado disminuciones en la expresión de Prx3 con la oxidación de cardiolipina, fosfolípido abundante y de relevancia fisiopatológica presente en la membrana mitocondrial interna, se desconoce si la enzima es capaz de reducir hidroperóxidos de ácidos grasos (AG-OOH). En este proyecto nos planteamos investigar la actividad de la Prx3 en la reducción de AG-OOH, libres o formando parte de fosfolípidos. Para ello realizaremos experimentos con la enzima recombinante humana, así como en células endoteliales, células sensibles a AG-OOH. En primera instancia haremos una caracterización de la cinética de las reacciones de oxidación y sobreoxidación del tiol peroxidático de Prx3 recombinante por AG-OOH libres o integrando fosfolípidos, mediante cinética de estado estacionario o de ciclo único por espectrometría de flujo detenido. También investigaremos la reactividad de la Prx3 unida a proteína fluorescente verde sensible a cambios redox (Prx3-rsGFP2), sonda fluorescente recientemente desarrollada por integrantes de nuestra propuesta, con estos hidroperóxidos lipídicos en comparación con otros hidroperóxidos, para validar su uso como sonda de dichos compuestos en tiempo real en células. Estudiaremos la afinidad de la Prx3 por AG-OOH por una combinación de técnicas de biofísica de proteínas y modelado molecular. Evaluaremos el efecto de la unión de la porción no reactiva de estos sustratos (AG) a la enzima sobre la reactividad con el grupo peroxilo. Por último, expondremos células endoteliales a dosis subletales de AG-OOH que se conoce ingresan a dichas células y se integran a sus fosfolípidos de membrana, así como a lipoproteínas de baja densidad (LDL) oxidadas. Investigaremos si dicha exposición conduce a la oxidación y sobreoxidación de Prx3 endógena, de Prx3-rsGFP2 y evaluaremos paralelamente las consecuencias en el potencial de membrana y funcionalidad mitocondrial, así como en la liberación

de citocromo c hacia el citosol. Consideramos que nuestros resultados permitirán una mejor comprensión del rol de la Prx3 en el sensado de AG-OOH a nivel celular. Asimismo, teniendo en cuenta el rol reportado para la enzima en procesos patológicos, nuestros resultados podrían facilitar futuros desarrollos terapéuticos.

5 horas semanales

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: A. ZEIDA , TRUJILLO, M., ANÍBAL M. REYES, MANTA B , RADI, R , Hugo, M , Antonio Martínez Ruiz

#### **Metagenómica aplicada al descubrimiento de nuevas enzimas redox (03/2022 - a la fecha)**

Durante décadas el paradigma central de la biología redox fue que ciertos aminoácidos reactivos como son blanco de oxidantes y que los seres vivos poseen enzimas antioxidantes para reparar o proteger a las biomoléculas de ese daño oxidativo. Sin embargo, hoy sabemos que varias enzimas antioxidantes son en realidad traductores de señales que median entre oxidantes fisiológicos y moléculas efectoras, principalmente factores de transcripción. La mayoría de estas enzimas dependen de la química redox de la cisteína, la cual se oxida reversiblemente en el proceso de transferencia de información. A diferencia de lo que sucede con la cisteína, la oxidación reversible de metionina a sulfóxido de metionina (MetSO) ha recibido menos atención y su rol en biología está menos explorado. Varios organismos poseen metionina sulfóxido reductasas (MSR) que reparan el MetSO, lo que sugiere que ésta oxidación es biológicamente relevante. Recientemente se descubrió una familia de enzimas (MICALs) con capacidad de oxidar metionina (actividad oxidasa de metionina, MOX) y su descubrimiento auguraba una revolución en biología redox, ya que la existencia MOX y MSR sugería la existencia de ciclos de regulación centrados en la oxidación reversible de metionina, análogo al formado por quinasas y fosfatasa. Sin embargo, esta revolución no sucedió, en parte porque muy pocas MOX han sido descubiertas, y restringido a unos pocos organismos, y en parte porque las MSR no son tan ubicuas como originalmente considerábamos. Este proyecto se basa en la hipótesis de que existen nuevas MSR y MOX por descubrir, fundamentalmente en procariotas. Para descubrir estas enzimas proponemos combinar genómica comparativa, metagenómica funcional, ingeniería de genomas y bioquímica de proteínas para revelar, mediante selecciones genéticas y screening, nuevas MSR y MOX. Esperamos que los resultados obtenidos en este proyecto permitan posicionar oxidación reversibles de metioninas como un eje central de la biología redox.

2 horas semanales

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Maestría/Magister:1

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: MANTA B , IRAOLA G. , A. ZEIDA , COMINI MA , Andrés Binolfi

#### **SARS-CoV-2 spike glycoprotein receptor binding domain (RBD) redox susceptibility (04/2021 - 04/2022)**

The project goal is to evaluate the spike glycoprotein RBD structural redox susceptibility at its four disulfide bonds in connection to binding properties to ACE2 and viral infectivity for SARS-CoV-2 major lineages (B, B.1, B.1.1.7, B.1.351, and P.1). With these studies we aim to a) establish a new research line in our laboratory connecting redox biology with viral infection processes, b) increase our understanding at the molecular level of the mechanisms of SARS-CoV-2 entry to human cells, c) assess structural changes in the spike protein RBD mediated by novel thiol-based compounds as a redox-based therapeutic strategy, d) foster a strong scientific collaboration with a leading US-based research group (Scripps Research, Florida).

10 horas semanales

Integrante del Equipo

Concluido

Financiación:

Richard Lounsbery Foundation, Estados Unidos, Apoyo financiero

Equipo: RADI, R , A. ZEIDA , M. MACHADO , CORREA, A , K. Carroll , MORATORIO, G.

#### **Susceptibilidad estructural al ambiente redox del dominio de unión al receptor (RBD) de la**

**glicoproteína espicular de SARS-CoV-2 (07/2020 - 05/2021 )**

Proyecto premiado por la Fundación Manuel Pérez, FMed, Udelar, en el marco del llamado "Fondos Especiales (COVID-19)". El objetivo del proyecto fue evaluar la susceptibilidad estructural del dominio RBD de la glicoproteína espicular de SARS-CoV-2 al ambiente redox y su posible efecto en la interacción con ACE2. Para ello se propuso una combinación de técnicas experimentales y simulaciones computacionales que permitieran una caracterización de la importancia del estado redox de los cuatro disulfuros que presenta el RBD.

5 horas semanales

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Financiación:

Facultad de Medicina, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: RADI, R., M. MACHADO, A. ZEIDA, TRUJILLO, M., CORREA, A., PORTELA, M.

Palabras clave: SARS-CoV-2 prote?na Spike disulfuros

**DOCENCIA****Doctor en Ciencias Biológicas (PEDECIBA) (05/2023 - a la fecha)**

Doctorado

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Radicales libres y procesos redox en biomedicina, 80 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Redox

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

Área Química (PEDECIBA)

**VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN****Otro (10/2018 - a la fecha)**

Investigador Gdo 3 2 horas semanales

**SECTOR ORGANIZACIONES PRIVADAS SIN FINES DE LUCRO/SOCIEDADES CIENTÍFICO-TECNOLÓGICAS - SOCIEDADES CIENTÍFICO-TECNOLÓGICAS - URUGUAY**

Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular

**VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN****Otro (11/2019 - 11/2021)**

Miembro Comisión Fiscal 2 horas semanales

**SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA**

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales Universidad de Buenos Aires

**VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN****Profesor visitante (08/2021 - 08/2021)**

15 horas semanales

**Funcionario/Empleado (03/2012 - 02/2018)** Trabajo relevante

Ayudante de Primera 12 horas semanales

**ACTIVIDADES**

## **DOCENCIA**

### **Licenciatura en Ciencias Químicas (03/2012 - 02/2018 )**

Grado

Asistente

Asignaturas:

Química General e Inorgánica, 12 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica /

### **Doctorado en Ciencias Químicas (06/2016 - 07/2016 )**

Doctorado

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Simulación computacional avanzada en Química, Bioquímica y Ciencias de Materiales, 40 horas,

Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica /

### **Doctorado en Ciencias Químicas (06/2013 - 07/2013 )**

Doctorado

Asistente

Asignaturas:

Simulación computacional avanzada en Química, Bioquímica y Ciencias de Materiales, 40 horas,

Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica /

## **EXTENSIÓN**

### **(07/2016 - 07/2016 )**

FCEN - UBA

10 horas

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica /

### **(07/2015 - 07/2015 )**

FCEN - UBA

10 horas

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica /

### **(07/2014 - 07/2014 )**

FCEN - UBA

10 horas

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica /

### **(04/2014 - 05/2014 )**

FCEN - UBA

5 horas

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica /

### **(04/2013 - 06/2013 )**

FCEN - UBA

5 horas

Áreas de conocimiento:

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

## GESTIÓN ACADÉMICA

**Organizador: Primer Workshop Latinoamericano de Modelado Molecular y Simulación Computacional (06/2016 - 07/2016)**

FCEN - UBA

Gestión de la Enseñanza

Áreas de conocimiento:

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

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

Facultad de Medicina / Departamento de Bioquímica - Centro de Investigaciones Biomédicas (Ceinbio)

## VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

**Becario (10/2017 - 10/2019)**

Becario Posdoctoral 40 horas semanales

Escalafón: Docente

Grado: Grado 3

Cargo: Interino

## ACTIVIDADES

### PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

**Estructura, dinámica y función de la enzima metionina sulfóxido reductasa B de *Mycobacterium tuberculosis* (04/2018 - 10/2019)**

*Mycobacterium tuberculosis* (Mt) es un patógeno altamente exitoso, capaz de vivir y proliferar en el fagosoma de macrófagos activados, donde es expuesto a especies oxidantes como superóxido, óxido nítrico y distintos peróxidos. Estas especies son capaces de modificar distintas biomoléculas. Es así que el estudio de los sistemas antioxidantes del patógeno resulta de suma importancia para caracterizar los actores y mecanismos moleculares que determinan su extraordinaria capacidad infectiva. En este contexto, la sulfoxidación de residuos de metionina, es una modificación oxidativa reversible implicada en la regulación de la funcionalidad proteica. Mt expresa dos metionina sulfóxido reductasas, MtMsrA y MtMsrB, que reducen los epímeros S y R del sulfóxido de metionina, respectivamente. Para ambas enzimas, el primer paso en la catálisis consiste en la interacción de la metionina-sulfóxido con la cisteína nucleofílica del sitio activo, que resulta oxidada a ácido sulfénico y la liberación de metionina reducida. Los siguientes pasos, que varían según la Msr específica, se encargan de la reducción de la forma oxidada de la enzima a la forma nativa y pueden estar acompañados de grandes cambios conformacionales. La ausencia de estos sistemas antioxidantes implica un aumento de la citotoxicidad causada por especies oxidantes, lo que las convierte en potenciales blancos terapéuticos. Este plan tiene como objetivo central caracterizar integralmente la relación estructura/dinámica-función de la MtMsrB. Esta caracterización se realizará mediante un enfoque multi-disciplinario tanto desde el punto de vista de las técnicas experimentales a utilizar como desde las estrategias teóricas a desarrollarse. Primeramente, se caracterizará la enzima desde el punto de vista biofísico, con el fin de conocer aspectos microscópicos de la enzima en solución en presencia y ausencia de sustratos. Asimismo, se pretende obtener la estructura cristalográfica de la MtMsrB, que no ha sido reportada hasta el momento. También se caracterizará el sistema desde el punto de vista cinético, y la dependencia de los parámetros catalíticos con el pH y la temperatura. Por último, se utilizarán métodos teóricos de modelado, para determinar las bases moleculares del proceso catalítico. Cabe destacar que aunque el plan de trabajo se realizará en el CEINBIO, FMed-UdeLaR, donde se cuenta con amplia experiencia en sistemas antioxidantes de Mt, el mismo significará la interacción activa con grupos de trabajo en el Institut Pasteur de Montevideo y las Facultades de Farmacia y Bioquímica y de Ciencias Exactas de la Universidad de Buenos Aires.

20 horas semanales



Investigación  
Coordinador o Responsable  
Concluido  
Financiación:  
Dirección de Innovación, Ciencia y Tecnología, Uruguay, Apoyo financiero  
Equipo: A. ZEIDA , TRUJILLO, M., RADI, R  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

## **DOCENCIA**

### **curso Posgrado PEDECIBA (02/2019 - 03/2019)**

Doctorado  
Invitado  
Asignaturas:  
Biología y Química Redox de Tioles, 60 horas, Teórico-Práctico  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /

### **SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA**

Universidad de Buenos Aires / Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

## **VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

### **Profesor visitante (07/2019 - 08/2019)**

Profesor del curso de posgrado: "Escuela de modelado de biomoléculas" 25 horas semanales

### **Profesor visitante (07/2018 - 08/2018)**

Profesor del curso de posgrado: "Escuela de modelado de biomoléculas" 25 horas semanales

## **ACTIVIDADES**

## **DOCENCIA**

### **Doctorado en Química (07/2019 - 08/2019)**

Doctorado  
Responsable  
Asignaturas:  
Escuela de modelado de biomoléculas, 80 horas, Teórico-Práctico  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

### **Doctorado en Química (07/2018 - 08/2018)**

Doctorado  
Responsable  
Asignaturas:  
Escuela de modelado de biomoléculas, 80 horas, Teórico-Práctico  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

### **SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA**

CONICET

## **VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

### **Becario (03/2016 - 10/2017)**

Becario Posdoctoral 40 horas semanales / Dedicación total

**Becario (05/2011 - 02/2016)** Trabajo relevante

Becario Doctoral 40 horas semanales / Dedicación total

**ACTIVIDADES****LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN**

**Caracterización funcional, estructural y dinámica de la peroxidasa Peroxirredoxina Q de *Mycobacterium tuberculosis* (03/2016 - a la fecha )**

Fundamental  
40 horas semanales  
IQUIFIB, FFyB - UBA , Integrante del equipo  
Equipo:

**Estructura y mecanismo de acción de peroxirredoxinas: estudio teórico y experimental (05/2011 - 02/2016 )**

Fundamental  
40 horas semanales  
INQUIMAE, FCEN - UBA , Integrante del equipo  
Equipo:

**SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - PARAGUAY**

Facultad Politécnica, Universidad Nacional de Asunción

**VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

**Profesor visitante (09/2013 - 09/2013)**

20 horas semanales

**ACTIVIDADES****DOCENCIA**

**Didáctica Universitaria (09/2013 - 09/2013 )**

Doctorado  
Invitado  
Asignaturas:  
Introducción a la Simulación Computacional de Biomoléculas, 20 horas, Teórico-Práctico  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /

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

Facultad de Ciencias

**VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

**Funcionario/Empleado (07/2008 - 12/2008)**

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

**CARGA HORARIA**

Carga horaria de docencia: Sin horas  
Carga horaria de investigación: 48 horas  
Carga horaria de formación RRHH: 12 horas

## Producción científica/tecnológica

En el estudio de las ciencias de la vida, particularmente la bioquímica y la medicina, la aplicación de las herramientas de la fisicoquímica y la biología estructural, resulta en la combinación de conceptos de la física, la química y la biología en un intrincado y complejo mosaico que conduce a una comprensión única de los procesos microscópicos responsables de la vida.

Entre la gran variedad de clases de biomoléculas presentes en los seres vivos, las proteínas juegan un rol principal. Siendo las biomoléculas más versátiles y diversas; las proteínas están en el centro de la acción en los procesos biológicos. Es así que el estudio de las proteínas con las herramientas y fundamentalmente con la visión de la fisicoquímica y la biología estructural, ha constituido un gran aporte en el avance de la descripción de estos sistemas biomoleculares.

En este contexto, las preguntas que intentamos abarcar están directamente vinculadas al comportamiento de proteínas en sistemas

biológicos, incluyendo una perspectiva fisicoquímica y estructural, que permita entender estos fenómenos desde un punto de

vista microscópico. Muchos eventos celulares dependen del funcionamiento de proteínas y por lo tanto, las líneas de investigación contenidas en este espacio multidisciplinario son muchas. En particular, nuestro interés está focalizado en la descripción de las bases moleculares que determinan la capacidad catalítica de enzimas relacionadas con la homeostásis redox de la célula, y cuáles son los mecanismos que subyacen estos procesos.

## Producción bibliográfica

### ARTÍCULOS PUBLICADOS

#### ARBITRADOS

##### **Catalytic Mechanism of Mycobacterium tuberculosis Methionine Sulfoxide Reductase A (Completo, 2024)** Trabajo relevante

SANTIAGO SASTRE , BRUNO MANTA , JONATHAN A. SEMELAK , DARIO ESTRIN , MADIA TRUJILLO , RAFAEL RADÍ , ARI ZEIDA

Biochemistry, 2024

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: United states

ISSN: 00062960

E-ISSN: 15204995

DOI: [10.1021/acs.biochem.3c00504](https://doi.org/10.1021/acs.biochem.3c00504)

<http://dx.doi.org/10.1021/acs.biochem.3c00504>

ACS Editor's Choice awarded

Scopus® WEB OF SCIENCE™

##### **Revisiting the role of 3-nitrotyrosine residues in the formation of alpha-synuclein oligomers and fibrils (Completo, 2024)**

CECILIA CHAVARRÍA , RODRIGO IVAGNES , ARI ZEIDA , MARÍA DOLORES PIÑEYRO , JOSÉ M. SOUZA

Archives of Biochemistry and Biophysics, v.: 752 p.:109858 2024

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: United states

ISSN: 00039861

E-ISSN: 10960384

DOI: [10.1016/j.abb.2023.109858](https://doi.org/10.1016/j.abb.2023.109858)

<http://dx.doi.org/10.1016/j.abb.2023.109858>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

##### **Kinetic and structural assessment of the reduction of human 2?Cys peroxiredoxins by thioredoxins (Completo, 2023)**

SEBASTIÁN F. VILLAR , LAURA CORRALES?GONZÁLEZ , BELÉN MÁRQUEZ DE LOS SANTOS , JOAQUÍN DALLA RIZZA , ARI ZEIDA , ANA DENICOLA , GERARDO FERRER?SUETA

FEBS Journal, v.: 291 p.:778 - 794, 2023

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: United kingdom  
ISSN: 1742464X  
E-ISSN: 17424658  
DOI: [10.1111/febs.17006](https://doi.org/10.1111/febs.17006)  
<http://dx.doi.org/10.1111/febs.17006>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Minimum Free Energy Pathways of Reactive Processes with Nudged Elastic Bands (Completo, 2023)**

JONATHAN A. SEMELAK , ARI ZEIDA , NICOLÁS O. FOGLIA , DARÍO A. ESTRIN  
Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 19 p.:6273 - 6293, 2023  
Medio de divulgación: Internet  
Lugar de publicación: United states  
ISSN: 15499618  
E-ISSN: 15499626  
DOI: [10.1021/acs.jctc.3c00366](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.3c00366)  
<http://dx.doi.org/10.1021/acs.jctc.3c00366>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Mitochondrial Peroxiredoxin 3 Is Rapidly Oxidized and Hyperoxidized by Fatty Acid Hydroperoxides (Completo, 2023)**

GIULIANA CARDOZO , MAURICIO MASTROGIOVANNI , ARI ZEIDA , NICOLÁS VIERA , RAFAEL  
RADI , ANÍBAL M. REYES , MADIA TRUJILLO  
Antioxidants, v.: 12 p.:408 2023  
Medio de divulgación: Internet  
Lugar de publicación: Switzerland  
Escrito por invitación  
E-ISSN: 20763921  
DOI: [10.3390/antiox12020408](https://doi.org/10.3390/antiox12020408)  
<http://dx.doi.org/10.3390/antiox12020408>

Scopus®

**Redox sensitive human mitochondrial aconitase and its interaction with frataxin: In vitro and in silico studies confirm that it takes two to tango (Completo, 2023)**

SANTIAGO MANSILLA , VERÓNICA TÓRTORA , FLORENCIA PIGNATARO , SANTIAGO SASTRE  
, IGNACIO CASTRO , MA. LAURA CHIRIBAO , CARLOS ROBELLO , ARI ZEIDA , JAVIER SANTOS ,  
LAURA CASTRO  
Free Radical Biology and Medicine, v.: 197 p.:71 - 84, 2023  
Medio de divulgación: Internet  
Lugar de publicación: Netherlands  
ISSN: 08915849  
E-ISSN: 18734596  
DOI: [10.1016/j.freeradbiomed.2023.01.028](https://doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2023.01.028)  
<http://dx.doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2023.01.028>

Scopus®

**Novel Lennard-Jones Parameters for Cysteine and Selenocysteine in the AMBER Force Field (Completo, 2023)**

FEDERICO N. PEDRON , ANDRESA MESSIAS , ARI ZEIDA , ADRIÁN E. ROITBERG , DARÍO A.  
ESTRIN  
Journal of Chemical Information and Modeling, v.: 63 p.:595 - 604, 2023  
Medio de divulgación: Internet  
Lugar de publicación: United states  
ISSN: 15499596  
E-ISSN: 1549960X  
DOI: [10.1021/acs.jcim.2c01104](https://doi.org/10.1021/acs.jcim.2c01104)  
<http://dx.doi.org/10.1021/acs.jcim.2c01104>

Scopus®

**Possible molecular basis of the biochemical effects of cysteine-derived persulfides (Completo, 2022)**

ERNESTO CUEVASANTA , DAYANA BENCHOAM , JONATHAN A. SEMELAK , MATÍAS N.  
MÖLLER , ARI ZEIDA , MADIA TRUJILLO , BEATRIZ ALVAREZ , DARÍO A. ESTRIN  
Frontiers in Molecular Biosciences, v.: 9 2022  
Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Switzerland  
Escrito por invitación  
E-ISSN: 2296889X  
DOI: [10.3389/fmolb.2022.975988](https://doi.org/10.3389/fmolb.2022.975988)  
<http://dx.doi.org/10.3389/fmolb.2022.975988>

Scopus<sup>\*</sup>

**De novo sequencing and construction of a unique antibody for the recognition of alternative conformations of cytochrome c in cells (Completo, 2022)**

FLORENCIA TOMASINA, JENNYFER MARTÍNEZ, ARI ZEIDA, MARÍA LAURA CHIRIBAO, VERÓNICA DEMICHELI, AGUSTÍN CORREA, CELIA QUIJANO, LAURA CASTRO, ROBERT H. CARNAHAN, PAIGE VINSON, MATT GOFF, TRACY COOPER, W. HAYES MCDONALD, NATALIE CASTELLANA, LUCIANA HANNIBAL, PAUL T. MORSE, JUNMEI WAN, MAIK HÜTTEMANN, RONALD JEMMERSON, LUCÍA PIACENZA, RAFAEL RADI  
Proceedings of the National Academy of Sciences, v.: 119 2022  
Medio de divulgación: Internet  
Lugar de publicación: United states  
ISSN: 00278424  
E-ISSN: 10916490  
DOI: [10.1073/pnas.2213432119](https://doi.org/10.1073/pnas.2213432119)  
<http://dx.doi.org/10.1073/pnas.2213432119>

Scopus<sup>\*</sup>

**Thiol-based chemical probes exhibit antiviral activity against SARS-CoV-2 via allosteric disulfide disruption in the spike glycoprotein (Completo, 2022)**

Trabajo relevante

YUNLONG SHI, ARI ZEIDA, CAITLIN E. EDWARDS, MICHAEL L. MALLORY, SANTIAGO SASTRE, MATÍAS R. MACHADO, RAYMOND J. PICKLES, LING FU, KEKE LIU, JING YANG, RALPH S. BARIC, RICHARD C. BOUCHER, RAFAEL RADI, KATE S. CARROLL  
Proceedings of the National Academy of Sciences, v.: 119 6, 2022  
Lugar de publicación: United states  
ISSN: 00278424  
E-ISSN: 10916490  
DOI: [10.1073/pnas.2120419119](https://doi.org/10.1073/pnas.2120419119)  
<http://dx.doi.org/10.1073/pnas.2120419119>  
YS, AZ y CE contribuyeron igualmente en este trabajo

Scopus<sup>\*</sup>

**The superoxide radical switch in the biology of nitric oxide and peroxynitrite (Completo, 2022)**

LUCÍA PIACENZA, ARI ZEIDA, MADIA TRUJILLO, RAFAEL RADI  
Physiological Reviews, 2022  
Medio de divulgación: Internet  
Lugar de publicación: United states  
Escrito por invitación  
ISSN: 00319333  
E-ISSN: 15221210  
DOI: [10.1152/physrev.00005.2022](https://doi.org/10.1152/physrev.00005.2022)  
<http://dx.doi.org/10.1152/physrev.00005.2022>

Scopus<sup>\*</sup>

**Crystal structure of Trypanosoma cruzi heme peroxidase and characterization of its substrate specificity and compound I intermediate (Completo, 2022)**

SAMUEL L. FREEMAN, VERA SKAFAR, HANNA KWON, ALISTAIR J. FIELDING, PETER C.E. MOODY, ALEJANDRA MARTÍNEZ, FEDERICO M. ISSOGLIO, LUCAS INCHAUSTI, PABLO SMIRCICH, ARI ZEIDA, LUCÍA PIACENZA, RAFAEL RADI, EMMA L. RAVEN  
Journal of Biological Chemistry, v.: 298 p.:102204 2022  
Medio de divulgación: Internet  
Lugar de publicación: United states  
ISSN: 00219258  
E-ISSN: 1083351X  
DOI: [10.1016/j.jbc.2022.102204](https://doi.org/10.1016/j.jbc.2022.102204)  
<http://dx.doi.org/10.1016/j.jbc.2022.102204>

Scopus<sup>\*</sup>

**Akt Is S-Palmitoylated: A New Layer of Regulation for Akt (Completo, 2021)**

MATÍAS BLAUSTEIN , ESTEFANÍA PIEGARI , CAMILA MARTÍNEZ CALEJMAN , ANTONELLA VILA , ANALÍA AMANTE , MARÍA VICTORIA MANESE , ARI ZEIDA , LAURENCE ABRAMI , MARIELA VEGGETTI , DAVID A. GUERTIN , F. GISOU VAN DER GOOT , MARÍA MARTHA CORVI , ALEJANDRO COLMAN-LERNER  
Frontiers in Cell and Developmental Biology, v.: 9 2021  
Lugar de publicación: Switzerland  
E-ISSN: 2296634X  
DOI: [10.3389/fcell.2021.626404](https://doi.org/10.3389/fcell.2021.626404)  
<http://dx.doi.org/10.3389/fcell.2021.626404>

Scopus'

**Cardiolipin interactions with cytochrome c increase tyrosine nitration yields and site-specificity (Completo, 2021)**

VERÓNICA DEMICHELI , FLORENCIA TOMASINA , SANTIAGO SASTRE , ARI ZEIDA , VERÓNICA TÓRTORA , ANALÍA LIMA , CARLOS BATTHYÁNY , RAFAEL RADI  
Archives of Biochemistry and Biophysics, v.: 703 108824 , 2021  
Lugar de publicación: United states  
ISSN: 00039861  
E-ISSN: 10960384  
DOI: [10.1016/j.abb.2021.108824](https://doi.org/10.1016/j.abb.2021.108824)  
<http://dx.doi.org/10.1016/j.abb.2021.108824>

Scopus'

**PIP aquaporin pH?sensing is regulated by the length and charge of the C?terminal region (Completo, 2021)**

FEBS Journal, v.: 289 p.:246 - 261, 2021  
Medio de divulgación: Internet  
Lugar de publicación: United kingdom  
ISSN: 1742464X  
E-ISSN: 17424658  
DOI: [10.1111/febs.16134](https://doi.org/10.1111/febs.16134)  
<http://dx.doi.org/10.1111/febs.16134>  
A. Zeida, K. Allewa (corresponding authors)

Scopus'

**Genetic and transcriptomic evidences suggest ARO10 genes are involved in benzenoid biosynthesis by yeast (Completo, 2020)**

Valera, M.J. , A. ZEIDA , BOIDO, E. , G. Beltrán , Torija, M.J. , Mas, A. , RADI, R , DELLACASSA, E , CARRAU, F.  
Yeast, p.:1 - 9, 2020  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /  
ISSN: 0749503X  
E-ISSN: 10970061  
DOI: [10.1002/yea.3508](https://doi.org/10.1002/yea.3508)

Scopus'

**Acidity and nucleophilic reactivity of glutathione persulfide (Completo, 2020)**

DAYANA BENCHOAM , JONATHAN A. SEMELAK , ERNESTO CUEVASANTA , MAURICIO MASTROGIOVANNI , JUAN S. GRASSANO , GERARDO FERRER-SUETA , ARI ZEIDA , MADIA TRUJILLO , MATÍAS N. MÖLLER , DARÍO A. ESTRIN , BEATRIZ ALVAREZ  
Journal of Biological Chemistry, v.: 295 p.:15466 - 15481, 2020  
Lugar de publicación: United states  
ISSN: 00219258  
E-ISSN: 1083351X  
DOI: [10.1074/jbc.ra120.014728](https://doi.org/10.1074/jbc.ra120.014728)  
<http://dx.doi.org/10.1074/jbc.ra120.014728>

Scopus'

**In vivo observation of peroxiredoxins oligomerization dynamics (Completo, 2020)**

A. ZEIDA , MANTA B , TRUJILLO, M.  
PNAS, v.: 117 32 , p.:18918 - 18920, 2020  
Areas de conocimiento:

**Mechanisms and consequences of protein cysteine oxidation: the role of the initial short-lived intermediates (Completo, 2020)**

TURELL, L., A. ZEIDA, TRUJILLO, M.

Essays in Biochemistry, v.: 64 1, p.:55 - 66, 2020

Escrito por invitación

ISSN: 00711365

E-ISSN: 17441358

DOI: [10.1042/EBC20190053](https://doi.org/10.1042/EBC20190053)

Turell, L. y Zeida, A. contribuyeron igualmente en este trabajo

Scopus\*

**Exploring the conformational transition between the fully folded and locally unfolded substates of Escherichia coli thiol peroxidase (Completo, 2020)**

D. S. Vazquez, A. ZEIDA, W. A. Agudelo, M. R. Montes, FERRER-SUETA, G., J. Santos

Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 22 p.:9518 - 9533, 2020

Palabras clave: peroxirredoxinas cambio conformacional biofísica de proteínas cisteínas reactivas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 14639076

E-ISSN: 14639084

DOI: <https://doi.org/10.1039/D0CP00140F>

Scopus\*

**Substrate and Product-Assisted Catalysis: Molecular Aspects behind Structural Switches along Organic Hydroperoxide Resistance Protein Catalytic Cycle (Completo, 2020)**

R. M. Domingos, R. D. Teixeira, A. ZEIDA, W. A. Agudelo, T. G. P. Alegria, J. F. da Silva Neto, P. S.

Vieira, M. T. Murakami, C. S. Farah, D. A. Estrin, L. E. S. Netto

ACS Catalysis, v.: 10 p.:6587 - 6602, 2020

Palabras clave: peroxirredoxina cisteínas reactivas cambios estructurales biofísica de proteínas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Medio de divulgación: Internet

E-ISSN: 21555435

DOI: <https://doi.org/10.1021/acscatal.0c01257>

Scopus\*

**Catalysis of Peroxide Reduction by Fast Reacting Protein Thiols (Completo, 2019)** Trabajo relevante

ZEIDA, A., TRUJILLO, M., FERRER-SUETA, G., DENICOLA, A., ESTRIN, DA, RADI, R

Chemical Reviews, v.: 119 19, p.:10829 - 10855, 2019

Palabras clave: thiol peroxides thiol peroxidases

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

Medio de divulgación: Internet

Escrito por invitación

ISSN: 00092665

E-ISSN: 15206890

DOI: [10.1021/acs.chemrev.9b00371](https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.9b00371)

Scopus\* WEB OF SCIENCE™

**Multiscale Modeling of Thiol Overoxidation in Peroxiredoxins by Hydrogen Peroxide (Completo, 2019)**

J. A. SEMELAK, F. BATTISTINI, RADI, R, TRUJILLO, M., A. ZEIDA, D. A. ESTRIN

Journal of Chemical Information and Modeling, v.: 60 p.:843 - 853, 2019

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

Medio de divulgación: Internet

Escrito por invitación

ISSN: 15499596  
E-ISSN: 1549960X  
DOI: [10.1021/acs.jcim.9b00817](https://doi.org/10.1021/acs.jcim.9b00817)  
Zeida, A. es co-autor de correspondencia  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**A computational investigation of the reactions of tyrosyl, tryptophanyl, and cysteinyl radicals with nitric oxide and molecular oxygen (Completo, 2019)**

FN PEDRÓN, BARTESAGHI, S., DA ESTRIN, RADI, R., A. ZEIDA  
Free Radical Research, v.: 53 1, p.:18 - 25, 2019  
Palabras clave: Amino acid-derived radicals; nitric oxide; one-electron oxidation; oxygen  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 10715762  
E-ISSN: 10292470  
DOI: [10.1080/10715762.2018.1541322](https://doi.org/10.1080/10715762.2018.1541322)  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**From quantum to subcellular scales: multiscale simulation approaches and the SIRAH force field (Completo, 2019)**

M. MACHADO, A. ZEIDA, DARRÉ L., PANTANO S.  
Interface Focus, v.: 9 3, 2019  
Palabras clave: molecular dynamics coarse-grain SIRAH QM/MM/CG hybrid  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /  
Medio de divulgación: Internet  
Escrito por invitación  
ISSN: 20428898  
E-ISSN: 20428901  
DOI: [10.1098/rsfs.2018.0085](https://doi.org/10.1098/rsfs.2018.0085)  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Gating in plant plasma membrane aquaporins: the involvement of leucine in the formation of a pore constriction in the closed state (Completo, 2019)**

CANESSA FORTUNA A., ZERBETTO DE PALMA G., ALIPERTI CAR L., ARMENTIA L., VITALI V.,  
A. ZEIDA, ESTRIN DA, ALLEVA K.  
FEBS Journal, 2019  
Palabras clave: aquaporin; gating; leucine plug; molecular dynamics; water transport  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 1742464X  
E-ISSN: 17424658  
DOI: [10.1111/febs.14922](https://doi.org/10.1111/febs.14922)  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Commentary on "Using resonance synchronous spectroscopy to characterize the reactivity and electrophilicity of biologically relevant sulfane sulfur". Evidence that the methodology is inadequate because it only measures unspecific light scattering (Completo, 2019)**

CUEVASANTA, E., BENCHOAM, D., FERRER-SUETA, G., A. ZEIDA, DENICOLA, A., ALVAREZ, B.,  
MÖLLER, MN  
Redox Biology, 2019  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 22132317  
DOI: [10.1016/j.redox.2019.101281](https://doi.org/10.1016/j.redox.2019.101281)  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Kinetics of formation and reactivity of the persulfide in the one-cysteine peroxiredoxin from Mycobacterium tuberculosis (Completo, 2019)**

CUEVASANTA, E., ANÍBAL M. REYES, A. ZEIDA, MASTROGIOVANNI, M., María Inés De Armas,



RADI, R., ALVAREZ, B., TRUJILLO, M.

Journal of Biological Chemistry, 2019

Palabras clave: hydrogen sulfide; persulfide; hydrodisulfide; sulfenic acid peroxiredoxin (Prx); alkyl hydroperoxide reductase E; Mycobacterium tuberculosis; signaling compound; antioxidant defense  
Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00219258

E-ISSN: 1083351X

DOI: [10.1074/jbc.RA119.008883](https://doi.org/10.1074/jbc.RA119.008883)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Chemical Reactivity and Spectroscopy Explored From QM/MM Molecular Dynamics Simulations Using the LIO Code (Completo, 2018)**

J.P. MARCOLONGO, A. ZEIDA, J.A. SEMELAK, N.O. FOGLIA, U.N. MORZÁN, D.A. ESTRIN, M.C. GONZÁLEZ LEBRERO, D.A. SCHERLIS

Frontiers in Chemistry, v.: 6 2018

Palabras clave: QM/MM DFT GPU free energy TDDFT

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Química Teórica y Computacional

Escrito por invitación

E-ISSN: 22962646

DOI: [10.3389/fchem.2018.00070](https://doi.org/10.3389/fchem.2018.00070)

Marcolongo, J.P. y Zeida, A. contribuyeron igualmente en este trabajo

**Kinetics, subcellular localization, and contribution to parasite virulence of a Trypanosoma cruzi hybrid type A heme peroxidase (TcAPx-CcP) (Completo, 2017)** Trabajo relevante

M HUGO, A. MARTINEZ, M. TRUJILLO, D. ESTRADA, M. MASTROGIOVANNI, E LINARES, O AUGUSTO, F. ISSOGLIO, A. ZEIDA, DA ESTRIN, HF HEIJNEN, L. PIACENZA, R. RADI

Proceedings of the National Academy of Sciences, v.: 114 8, 2017

Palabras clave: kinetics Trypanosoma cruzi heme peroxidase virulence oxidants

Areas de conocimiento:

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

ISSN: 00278424

E-ISSN: 10916490

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Theoretical investigation of the mechanism of nitroxyl decomposition in aqueous solution (Completo, 2016)**

M. BRINGAS, J. SEMELAK, A. ZEIDA, D. A. ESTRIN

Journal of Inorganic Biochemistry, v.: 162 p.:102 - 108, 2016

Palabras clave: Aqueous decomposition Mechanism Nitroxyl QM/MM Reactive nitrogen species

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 01620134

DOI: [10.1016/j.jinorgbio.2016.06.016](https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2016.06.016)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Exploring the Catalytic Mechanism of Human Glutamine Synthetase by Computer Simulations (Completo, 2016)**

F. M. ISSOGLIO, N. CAMPOLO, A. ZEIDA, T. GRUNE, R. RADI, D. A. ESTRIN, S. BARTESAGHI

Biochemistry, v.: 55 42, p.:5907 - 5916, 2016

Palabras clave: Catalytic mechanisms Classical molecular dynamics Glutamine synthetase Reaction free energy

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00062960

E-ISSN: 15204995

**PrxQ B from Mycobacterium tuberculosis is a monomeric, thioredoxin-dependent and highly efficient fatty acid hydroperoxide reductase (Completo, 2016)**

ANIBAL M. REYES, D. S. VAZQUEZ, A. ZEIDA, M HUGO, M. D. PIÑEYRO, M. I. DE ARMAS, D. A. ESTRIN, R. RADI, J. SANTOS, M. TRUJILLO

Free Radical Biology and Medicine, v.: 101 p.:249 - 260, 2016

Palabras clave: Mycobacterium tuberculosis Fatty acid hydroperoxides Peroxidatic and resolving cysteine Peroxiredoxin Thiol-dependent peroxidase

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 08915849

E-ISSN: 18734596

DOI: [10.1016/j.freeradbiomed.2016.10.005](https://doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2016.10.005)

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

**Nitrosodisulfide [S2NO]– (perthionitrite) is a true intermediate during the cross-talk of nitrosyl and sulfide (Completo, 2016)**

J. P. MARCOLONGO, U. N. MORZÁN, A. ZEIDA, D. A. SCHERLIS, J. A. OLABE

Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 18 p.:30047 - 30052, 2016

Areas de conocimiento:

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

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 14639076

E-ISSN: 14639084

DOI: [10.1039/C6CP06314D](https://doi.org/10.1039/C6CP06314D)

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

**Molecular Basis of Hydroperoxide Specificity in Peroxiredoxins: The Case of AhpE from Mycobacterium tuberculosis (Completo, 2015)**

Trabajo relevante

A. ZEIDA, ANIBAL M. REYES, P. LICHTIG, M HUGO, D. S. VAZQUEZ, J. SANTOS, L. GONZÁLEZ FLECHA, R. RADI, D. A. ESTRIN, M. TRUJILLO

Biochemistry, v.: 54 49, p.:7237 - 7247, 2015

Palabras clave: Peroxiredoxins Mycobacterium tuberculosis Bacterial Proteins Molecular Dynamics Simulation Substrate Specificity

Areas de conocimiento:

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00062960

E-ISSN: 15204995

DOI: [10.1021/acs.biochem.5b00758](https://doi.org/10.1021/acs.biochem.5b00758)

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

**Insights into the mechanism of the reaction between Hydrogen sulfide and peroxyxynitrite (Completo, 2015)**

E. CUEVASANTA, A. ZEIDA, S. CARBALLAL, R. WEEDMAN, U. N. MORZÁN, M. TRUJILLO, R. RADI, D. A. ESTRIN, M. R. FILIPOVIC, B. ALVAREZ

Free Radical Biology and Medicine, v.: 80 2015

Palabras clave: Peroxyxynitrite hydrogen sulfide kinetics persulfides free radicles

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

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

ISSN: 08915849

E-ISSN: 18734596

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

**Thiol redox biochemistry: insights from computer simulations (Completo, 2014)**

A. ZEIDA, C. M. GUARDIA, P. LICHTIG, L. L. PERISSINOTTI, L. A. DEFELIPE, A. TURJANSKI, R.

RADI, M. TRUJILLO, D. A. ESTRIN  
Biophysical Reviews, v.: 6 p.:27 - 46, 2014  
Palabras clave: Thiols Oxidation Redox homeostasis Computer simulations  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /  
Escrito por invitación  
ISSN: 18672450  
E-ISSN: 18672469  
DOI: [10.1007/s12551-013-0127-x](https://doi.org/10.1007/s12551-013-0127-x)  
Scopus\*

**The Extraordinary Catalytic Ability of Peroxiredoxins: a Combined Experimental and QM/MM Study on the Fast Thiol Oxidation Step (Completo, 2014)** Trabajo relevante

A. ZEIDA, ANIBAL M. REYES, M. C. G. LEBRERO, R. RADI, M. TRUJILLO, D. A. ESTRIN  
Chemical Communications, v.: 70 p.:10070 - 10073, 2014  
Palabras clave: Peroxiredoxins Thiol oxidation Activation parameters QM/MM simulations  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /  
ISSN: 13597345  
E-ISSN: 1364548X  
DOI: [10.1039/c4cc02899f](https://doi.org/10.1039/c4cc02899f)  
Scopus\* WEB OF SCIENCE™

**Improving Efficiency in SMD Simulations Through a Hybrid Differential Relaxation Algorithm (Completo, 2014)**

C. L. RAMIREZ, A. ZEIDA, G. E. JARA, A. E. ROITBERG, M. A. MARTI  
Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 10 p.:4609 - 4617, 2014  
Palabras clave: QM/MM simulations  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /  
ISSN: 15499618  
E-ISSN: 15499626  
DOI: [10.1021/ct500672d](https://doi.org/10.1021/ct500672d)  
Scopus\* WEB OF SCIENCE™

**Mechanism of cysteine oxidation by peroxynitrite: an integrated experimental and theoretical study (Completo, 2013)**

A. ZEIDA, M. C. G. LEBRERO, R. RADI, M. TRUJILLO, D. A. ESTRIN  
Archives of Biochemistry and Biophysics, v.: 539 p.:81 - 86, 2013  
Palabras clave: Thiols Cysteine Peroxynitrite Oxidation SN2 Redox homeostasis  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /  
ISSN: 00039861  
E-ISSN: 10960384  
DOI: [10.1016/j.abb.2013.08.016](https://doi.org/10.1016/j.abb.2013.08.016)  
Scopus\* WEB OF SCIENCE™

**Assessing the Accuracy of the SIRAH Force Field to Model DNA at Coarse Grain Level (Completo, 2013)**

P. D. DANS, L. DARRÉ, M. R. MACHADO, A. ZEIDA, A. F. BRANDNER, PANTANO, S  
Lecture Notes in Computer Science, v.: 8213 p.:71 - 81, 2013  
Palabras clave: Molecular dynamics nucleic acids simulations WT4 flexibility  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /  
Escrito por invitación  
ISSN: 03029743  
E-ISSN: 1611-3349  
DOI: [10.1007/978-3-319-02624-4\\_7](https://doi.org/10.1007/978-3-319-02624-4_7)  
Scopus\* WEB OF SCIENCE™

**Molecular basis of the mechanism of thiol oxidation by hydrogen peroxide in aqueous solution: challenging the SN2 paradigm (Completo, 2012)**

A. ZEIDA , R. BABBUSH , GONZALEZ LEBRERO, M. , M. TRUJILLO , R. RADÍ , ESTRIN, D  
Chemical Research in Toxicology, v.: 25 3 , p.:741 - 746, 2012

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

E-ISSN: 15205010

DOI: [10.1021/tx200540z](https://doi.org/10.1021/tx200540z)

**Breathing, bubbling, and bending: DNA flexibility from multimicrosecond simulations (Completo, 2012)**

A. ZEIDA , MACHADO, M. R. , P. D. DANS , PANTANO, S

Physical Review E, v.: 86 p.:21903 2012

Palabras clave: Molecular dynamics nucleic acids Coarse-grained force field

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 15393755

E-ISSN: 15502376

DOI: [10.1103/PhysRevE.86.021903](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.86.021903)

<http://pre.aps.org/abstract/PRE/v86/i2/e021903>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**A Coarse Grained Model for Atomic-Detailed DNA Simulations with Explicit Electrostatics (Completo, 2010)**

P. D. DANS , A. ZEIDA , MACHADO, M. , PANTANO, S

Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 6 p.:1711 - 1725, 2010

Palabras clave: Ácidos nucleicos Coarse-grain Dinámica Molecular

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 15499618

E-ISSN: 15499626

DOI: [10.1021/ct900653p](https://doi.org/10.1021/ct900653p)

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct900653p>

prevSearch=%255Bauthor%253A%2BDans%252C%2BDP.%2BD.%255D

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**LIBROS**

**Peroxisporins ( Participación , 2023)**

MATÍAS N. MÖLLER , KARINA ALLEVA , ARI ZEIDA , RAFAEL RADÍ

Publicado

Edición: 1, Peroxisporins

Editorial: CRC Press , Boca Raton

Tipo de publicación: Investigación

DOI: [10.1201/9781003160649-3](https://doi.org/10.1201/9781003160649-3)

Referado

Escrito por invitación

Medio de divulgación: Internet

ISSN/ISBN: 9781003160649

<http://dx.doi.org/10.1201/9781003160649-3>

Capítulos:

Diffusion and Transport of Peroxynitrite across Cell Membranes

Organizadores: I. Medraño-Fernandez, P. Bienert, and R. Sitia

Página inicial 21, Página final 40

**Redox Chemistry and Biology of Thiols ( Participación , 2022)**

ARI ZEIDA , RAFAEL RADÍ

Publicado , Redox Chemistry and Biology of Thiols  
Editorial: Elsevier  
Tipo de publicación: Investigación  
DOI: [10.1016/b978-0-323-90219-9.00028-5](https://doi.org/10.1016/b978-0-323-90219-9.00028-5)  
Referado  
Escrito por invitación  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN/ISBN: 9780323902199  
<http://dx.doi.org/10.1016/b978-0-323-90219-9.00028-5>

Capítulos:  
Thiol oxidation by biologically-relevant reactive species  
Organizadores: Beatriz Alvarez, Madia Trujillo, Marcelo Comini, Gustavo Salinas  
Página inicial 99, Página final 113

#### **Hydrogen Peroxide Metabolism in Health and Disease ( Participación , 2017)**

TRUJILLO, M., S. CARBALLAL, A. ZEIDA, RADI, R  
Publicado  
Editorial: Taylor&Francis, Boca Ratón  
Tipo de publicación: Investigación  
DOI: [10.1201/9781315154831-5](https://doi.org/10.1201/9781315154831-5)  
Referado  
Escrito por invitación  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN/ISBN: 9781498776158

Capítulos:  
Comparative Analysis of Hydrogen Peroxide and Peroxynitrite Reactivity with Thiols  
Organizadores: Madia TRUJILLO  
Página inicial 49, Página final 79

#### **Advances in Inorganic Chemistry ( Participación , 2017)**

JP MARCOLONGO, A. ZEIDA, L SLEP, JA OLABE  
Publicado  
Editorial: Elsevier, San Diego  
Tipo de publicación: Investigación  
DOI: [10.1016/bs.adioch.2017.02.002](https://doi.org/10.1016/bs.adioch.2017.02.002)  
Referado  
Escrito por invitación  
Palabras clave: Nitroxyl Thionitrous acid Thionitrite Perthionitrite Nitric oxide Nitrous oxide  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear /  
Medio de divulgación: Papel  
ISSN/ISBN: 978-0-12-815109-9

Capítulos:  
Thionitrous Acid/Thionitrite and Perthionitrite Intermediates in the "Crosstalk" of NO and H<sub>2</sub>S  
Organizadores: José A. Olabe  
Página inicial 277, Página final 309

#### **TEXTOS EN PERIÓDICOS O REVISTAS**

##### **La reina de la corona: la proteína Spike del nuevo coronavirus (2021)**

La Diaria 18,  
Periodicos  
A. ZEIDA

Medio de divulgación: Papel  
<https://ladiaria.com.uy/ciencia/articulo/2021/3/la-reina-de-la-corona-la-proteina-spike-del-nuevo-co>

##### **¿Avanzamos en la forma de tratar a los pacientes con covid-19? (2020)**

La Diaria 17,  
Periodicos  
BRIVA A , A. ZEIDA , RODRIGUEZ M , RADI, R

Medio de divulgación: Papel  
Fecha de publicación: 21/12/2020  
<https://ladiaria.com.uy/ciencia/articulo/2020/12/avanzamos-en-la-forma-de-tratar-a-los-pacientes-con>

#### **La dimensión espacial de la pandemia (2020)**

La Diaria 18,  
Periodicos  
Catalina Radi , PROLO C , Martín Cajade , A. ZEIDA

Medio de divulgación: Papel  
<https://ladiaria.com.uy/ciencia/articulo/2020/12/la-dimension-espacial-de-la-pandemia-de-coronavirus>

#### **?Nuevo coronavirus: ¿qué conocemos hasta ahora? (2020)**

La Diaria 12,  
Periodicos  
A. ZEIDA , RODRIGUEZ M , RADI, R

Medio de divulgación: Papel  
<https://ladiaria.com.uy/ciencia/articulo/2020/10/nuevo-coronavirus-que-conocemos-hasta-ahora/>

## **Producción técnica**

### **OTRAS PRODUCCIONES**

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

#### **Selenio (2019)**

A. ZEIDA

País: Argentina  
Idioma: Español  
Medio divulgación: Papel  
Web: <https://elgatoylacaja.com.ar/selenio/>  
Nota sobre el elemento Selenio en el contexto del libro "118. El universo en una tabla"  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

### **PROGRAMAS EN RADIO O TV**

#### **A partir del desarrollo de conocimiento generar beneficios para la salud (2019)**

A. ZEIDA  
Entrevista  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Web: <https://historiasdeciencia.uy/>  
Emisora: TVCiudad

#### **Fondo Vaz Ferreira para investigar la tuberculosis, un flagelo muy vigente (2018)**

A. ZEIDA  
Entrevista  
País: Uruguay  
Idioma: Español  
Web: <https://sobreciencia.uy/fondo-vaz-ferreira-para-investigar-la-tuberculosis-un-flagelo-muy-vigente/>  
Emisora: Radio Uruguay (1050 AM)

## ORGANIZACIÓN DE EVENTOS

### Segundo Encuentro Bienal de la SBBM (2020)

A. ZEIDA

Congreso

Sub Tipo: Otra

Lugar: Uruguay

Idioma: Español

Web: <https://www.sbbm.edu.uy/bienal2020>

Institución Promotora/Financiadora: Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular

## Evaluaciones

### EVALUACIÓN DE PROYECTOS

#### EVALUACIÓN INDEPENDIENTE DE PROYECTOS

##### CSIC Iniciación ( 2023 / 2023 )

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

##### CEBEM Mobility Fellowships 2023 ( 2023 / 2023 )

Argentina

Cantidad: Mas de 20

##### Becas ALAPA-iB3-FCEN ( 2022 / 2022 )

Argentina

Cantidad: De 5 a 20

##### CEBEM Mobility Fellowships 2022 ( 2022 / 2022 )

Argentina

Cantidad: Mas de 20

##### Fondo Clemente Estable 2018 (FCE 2018) ( 2018 / 2018 )

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

### EVALUACIÓN DE PUBLICACIONES

#### COMITÉ EDITORIAL

##### Comité Editorial "Redox Biochemistry and Chemistry" ( 2024 )

Tipo de publicación: Revista

Editorial: ScienceDirect

Cantidad: De 5 a 20

#### REVISIONES

##### Revisor de Free Radical Biology and Medicine ( 2017 )

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

### EVALUACIÓN DE CONVOCATORIAS CONCURSABLES

##### Concurso Gr.2 del Laboratorio de Química Teórica y Computacional, FCyEN, Udelar ( 2018 / 2018 )

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

### JURADO DE TESIS

**Doctor en Ciencias Químicas: "Estudio mecanístico y diseño de fármacos asistido por computadora contra el virus del dengue" ( 2023 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Ciencias Exactas y Naturales Universidad de Buenos Aires , Argentina

Nivel de formación: Doctorado

**Magister en Ciencias Químicas: "Estudio de la reacción de la hemoperoxidasa híbrida tipo A de Trypanosoma cruzi (APx-CcP) con peroxinitrito in vitro e in vivo" ( 2022 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

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

Nivel de formación: Maestría

**Doctor en Ciencias Químicas: "Reactividad de sulfuro inorgánico frente a modelos de sus blancos bioquímicos" ( 2020 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Ciencias Exactas y Naturales Universidad de Buenos Aires , Argentina

Nivel de formación: Doctorado

**Licenciatura en Bioquímica: "Caracterización cinética de la proteína de fusión TR-Trx-Tpx de Escherichia coli" ( 2019 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

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

Nivel de formación: Grado

**Licenciatura en Ciencias Físicas: "Dinámica molecular de proteínas a pH constante con modelos de grano grueso" ( 2019 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA /

Departamento de Física , Argentina

Nivel de formación: Grado

**Tesina Licenciatura en Bioquímica: "Modificaciones post-traduccionales de la peroxirredoxina 6 humana: consecuencias de su fosforilación y glicosilación" ( 2018 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

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

Nivel de formación: Grado

## Formación de RRHH

### TUTORÍAS CONCLUIDAS

#### POSGRADO

**Metionina sulfóxido reductasa A de Mycobacterium tuberculosis: desentrañando los secretos de su ciclo catalítico (2019 - 2022)** Trabajo relevante

Tesis de maestría

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Medicina /

Departamento de Bioquímica - CEINBIO , Uruguay

Programa: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas (PEDECIBA)

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad ( A. ZEIDA , RADI, R )

Nombre del orientado: Santiago Sastre

País: Uruguay

Palabras Clave: Mycobacterium tuberculosis metionina sulfóxido reductasabiología redox

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioquímica

#### OTRAS

**Bases moleculares de la reactividad de persulfuros y tiolatos frente a peróxido de hidrógeno**



Iniciación a la investigación

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA , Argentina

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: Jonathan Semelak

País: Argentina

#### **Bases moleculares de la reducción de peróxido de hidrógeno por peroxirredoxinas**

Iniciación a la investigación

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA , Argentina

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: Jonathan Semelak

País: Argentina

### **TUTORÍAS EN MARCHA**

#### **POSGRADO**

##### **Consecuencias dinámicas asociadas a la formación y reducción de disulfuros proteicos: el caso del dominio de unión al receptor de la proteína S de SARS-CoV-2 (2022)**

Tesis de doctorado

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

Programa: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas (PEDECIBA)

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad ( A. ZEIDA , RADI, R )

Nombre del orientado: Santiago Sastre

País/Idioma: Uruguay,

Palabras Clave: SARS-CoV2; glicoproteína espicular; disulfuros

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioquímica

##### **Estudio del transporte de agua y peróxido de hidrógeno en canales MIP (2021)**

Tesis de doctorado

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Farmacia y Bioquímica, Universidad de Buenos Aires , Argentina

Programa: Doctorado en Bioquímica

Tipo de orientación: Cotutor

Nombre del orientado: Jonathan Jesús Chevriau

País/Idioma: Argentina,

##### **Mecanismo catalítico de enzimas humanas encargadas de la oxidación y reducción estereoespecífica de metioninas proteicas. (2021)**

Tesis de doctorado

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA , Argentina

Programa: Doctorado en Ciencias Químicas

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad ( A. ZEIDA , D. A. Estrin )

Nombre del orientado: Andresa Messias

País/Idioma: Argentina,

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioquímica

##### **Consecuencias estructurales y funcionales de la nitración de tirosinas en proteínas celulares: el caso de la chaperona Hsp90 (2020)**

Tesis de maestría

Sector Educación Superior/Público / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas , Uruguay

Programa: Bioinformática

Tipo de orientación: Cotutor

Nombre del orientado: Alfonso Taboada

País/Idioma: Uruguay,

### **Otros datos relevantes**

#### **PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS**

**Mejor Póster (2018)**

(Nacional)

Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular

**The Carl Storm International Diversity Fellowship (2014)**

(Internacional)

Gordon Conferences

**PRESENTACIONES EN EVENTOS****Quién es Quién en Biofísica AUGM (2022)**

Seminario

Compuestos basados en tioles exhiben actividad antiviral contra SARS-CoV-2 a través de efectos alostéricos asociados a la reducción de disulfuros de la glicoproteína Spike

Argentina

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: Asociación Universidades Grupo Montevideo (AUGM)

**ENAIQUI 7 (2021)**

Congreso

Susceptibilidad redox del dominio de unión al receptor (RBD) de la glicoproteína espicular de SARS-CoV-2

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Química

**II SAIMS Webinar (2020)**

Seminario

Understanding the catalytic mechanism of methionine sulfoxide reductases from a multi-scale simulation approach

Brasil

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: South American Initiative on Molecular Simulations (SAIMS)

**4th Protein Biophysics at the End of the World (2019)**

Congreso

"Role of enzyme structure and dynamics in methionine sulfoxide reductases catalytic mechanism"

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

**4th Protein Biophysics at the End of the World (2019)**

Congreso

Chair "Protein Catalysis" session

Uruguay

Tipo de participación: Moderador Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

**Primer Encuentro Bial de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular (2018)**

Encuentro

Presentación de póster

Uruguay

Tipo de participación: Otros

Nombre de la institución promotora: Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular Areas de conocimiento:

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

**Thiol-Based Redox Regulation & Signaling (2018)**

Seminario

Catalytic Mechanism of the Methionine Sulfoxide Reductases from Mycobacterium Tuberculosis:

Structural, Dynamical and Biochemical Characterization

España

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: Gordon Research Seminar Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular

#### **Thiol-Based Redox Regulation & Signaling (2018)**

Congreso

Catalytic Mechanism of the Methionine Sulfoxide Reductases from Mycobacterium Tuberculosis:  
Structural, Dynamical and Biochemical Characterization

España

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Gordon Research Conference Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular

#### **V Latin American Protein Society Meeting (2016)**

Congreso

PrxQ B from Mycobacterium tuberculosis is a monomeric, thioredoxin- dependent and highly  
efficient fatty acid hydroperoxide reductase

Brasil

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 40

#### **Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions (2015)**

Simposio

Exploring the molecular basis of MtAhpE function: reaction mechanism and substrate specificity

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 40

#### **Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology. SBF.uy-SAB (2015)**

Congreso

Molecular basis of hydroperoxide specificity in peroxiredoxins: studies in AhpE from  
Mycobacterium tuberculosis

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 40

#### **XLII Annual Meeting of the Brazilian Society for Biochemistry and Molecular Biology (2014)**

Congreso

Catalytic ability of peroxiredoxins: an example of the power of biomolecular simulations

Brasil

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 40

#### **Thiol-Based Redox Regulation & Signaling (2014)**

Congreso

Molecular basis of thiol oxidation by peroxides: aqueous solution and peroxiredoxins

España

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Gordon Research Conference

#### **Thiol-Based Redox Regulation & Signaling, 2014 (2014)**

Seminario

Molecular basis of thiol oxidation by peroxides: aqueous solution and peroxiredoxins

España

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: Gordon Research Seminar

#### **10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemistry (2014)**

Congreso

Understanding the Catalytic Ability of Peroxiredoxins: a Combined Experimental and QM/MM  
Study on the Fast Thiol Oxidation Step

Chile  
Tipo de participación: Poster  
Carga horaria: 40

**XVIII Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica (2013)**

Congreso  
Bases moleculares del mecanismo de oxidación de tioles por peróxidos  
Argentina  
Tipo de participación: Poster  
Carga horaria: 40

**VIII Meeting of the Society for Free Radical Biology and Medicine - South American Group (2013)**

Congreso  
Molecular basis of thiol oxidation by peroxides  
Argentina  
Tipo de participación: Expositor oral  
Carga horaria: 40

**2das Jornadas +Biofísica (2013)**

Congreso  
Oxidación de tioles por peróxidos: entendiendo a las peroxirredoxinas  
Uruguay  
Tipo de participación: Expositor oral  
Carga horaria: 40

**II Latin American Federation of Biophysical Societies Congress (2012)**

Congreso  
Cysteine as a peroxidatic agent: aqueous solution vs. protein environment  
Brasil  
Tipo de participación: Poster  
Carga horaria: 40

**ISCB Latin America 2012 Conference on Bioinformatics (2012)**

Congreso  
Molecular basis of the mechanism of thiol oxidation by hydrogen peroxide in aqueous solution: challenging the SN2 paradigm  
Chile  
Tipo de participación: Poster  
Carga horaria: 40

**XL Reunión Anual Sociedad Argentina de Biofísica (2011)**

Congreso  
Dilucidando el mecanismo molecular de la oxidación de tioles por peróxido de hidrógeno  
Argentina  
Tipo de participación: Poster  
Carga horaria: 40

**1er Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (2010)**

Congreso  
Development of a Coarse-Grained Model at the base level for DNA Simulations  
Argentina  
Tipo de participación: Poster  
Nombre de la institución promotora: Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional  
Palabras Clave: coarse grain model DNA  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Otros Tópicos Biológicos / Biología Computacional

**6tas. JORNADAS Sociedad Uruguay de Bioquímica y Biología Molecular (2009)**

Congreso  
Desarrollo de un modelo de grano-grueso para simulación de ADN  
Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

### **Sociedad Argentina de Investigación en Bioquímica y Biología Molecular**

Congreso

Kinetic and dynamical characterization of an antioxidant system from Mycobacterium Tuberculosis  
Argentina

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 40

### **CONSTRUCCIÓN INSTITUCIONAL**

Uno de los proyectos transversales del Departamento de Bioquímica y el CEINBIO dentro de la Facultad de Medicina, UDELAR, es el estudio de la relación estructura-función en distintas enzimas de relevancia redox, tanto en humanos como en organismos patógenos, como Trypanosoma cruzi y Mycobacterium tuberculosis. Esta línea de trabajo general, ha dado lugar a una diversidad de proyectos particulares que han sido financiados en varias oportunidades por subsidios tanto nacionales como internacionales, permitiendo su consolidación, y han dado lugar a un importante número de publicaciones en revistas arbitradas de gran impacto para el área. Es así que desde hace 2 años, impulsé la creación de la plataforma ?Bioquímica Computacional y Estructural? en nuestro laboratorio, buscando profundizar el impacto de esta área particular en los distintos proyectos. En ese contexto, venimos desarrollando fuertemente diferentes líneas de investigación promoviendo la inclusión de conceptos de Biología Estructural en las mismas, así como la formación de recursos humanos en el área, y la inclusión de estos conceptos en las distintas actividades de enseñanza tanto de grado como de posgrado.

Además, cabe destacar que desde el 2019 vengo trabajando en la consolidación y puesta en marcha del Programa de Alimentos y Salud Humana. Este Programa, ya en marcha, significa un gran hito para la Facultad de Medicina, significando la remodelación de cientos de metros cuadrados de su planta edilicia, instalación de nuevos grupos de investigación en el área, formación de recursos humanos especializados, así como nuevas oportunidades de vinculación con el sector productivo. Durante los próximos años continuaré trabajando en este sentido, apoyando distintas tareas referidas al Programa, en particular en la coordinación del recientemente aprobado programa de posgrado: Maestría en Ciencias de los Alimentos y Salud Humana.

### **Indicadores de producción**

|                                                        |           |
|--------------------------------------------------------|-----------|
| <b>PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA</b>                        | <b>52</b> |
| <b>Artículos publicados en revistas científicas</b>    | 44        |
| Completo                                               | 44        |
| <b>Libros y Capítulos</b>                              | 4         |
| Capítulos de libro publicado                           | 4         |
| <b>Textos en periódicos</b>                            | 4         |
| Periodicos                                             | 4         |
| <b>Otros tipos</b>                                     | 4         |
| <b>PRODUCCIÓN TÉCNICA</b>                              | <b>4</b>  |
| <b>EVALUACIONES</b>                                    | <b>14</b> |
| <b>Evaluación de proyectos</b>                         | 5         |
| <b>Evaluación de publicaciones</b>                     | 2         |
| <b>Evaluación de convocatorias concursables</b>        | 1         |
| <b>Jurado de tesis</b>                                 | 6         |
| <b>FORMACIÓN RRHH</b>                                  | <b>7</b>  |
| <b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</b> | 3         |

|                                                       |          |
|-------------------------------------------------------|----------|
| Tesis de maestria                                     | 1        |
| Iniciación a la investigación                         | 2        |
| <b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha</b> | <b>4</b> |
| Tesis de maestria                                     | 1        |
| Tesis de doctorado                                    | 3        |
|                                                       |          |
|                                                       |          |