



Curriculum Vitae

Eduardo BERMUDEZ GABRIEL

Actualizado: 08/12/2016



Publicado: 20/07/2017

Sistema Nacional de Investigadores

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas

Categorización actual: Iniciación

Ingreso al SNI: Activo(01/06/2015)

Datos generales

Información de contacto

E-mail: ebermudez@fq.edu.uy

Institución principal

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

Dirección institucional

Dirección: Facultad de Química - UDeLaR / Avenida Gral. Flores 2124 / 11800 / Montevideo / Montevideo / Uruguay

Teléfono: (+598) 29241880

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

Formación

Formación concluida

Formación académica/Titulación

Grado

2004 - 2011

Grado

Química

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

Obtención del título: 2012

Palabras clave: Químico; Grado

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

2004 - 2007

Pregrado

Bachiller en Química

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

Obtención del título: 2008

Palabras clave: Bachiller; Pregrado

Formación en marcha

Formación académica/Titulación

Posgrado

2012 Doctorado
Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)
Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay
Título: Nuevos blancos para nuevos antibióticos: Predicción de poli-farmacología de inhibidores de Sortasa A.
Tutor/es: Patricia Saenz Méndez y Leif A. Eriksson.
Becario de: Agencia Nacional de Investigación e Innovación , Uruguay
Palabras clave: Sortasa A; Poli-farmacología; Antibióticos
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química computacional

Construcción institucional

Idiomas

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

Áreas de actuación

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

Actuación Profesional

Cargos desempeñados actualmente

Desde: 09/2009
Ayudante de Química Computacional , (Docente Grado 1 Interino, 20 horas semanales) , Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay
Desde: 10/2012
Estudiante de Posgrado , (5 horas semanales) , Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas , Uruguay
Desde: 11/2014
(1 horas semanales) , Goteborgs Universitet , Suecia

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

Vínculos con la institución

02/2009 - 09/2009, *Vínculo:* Colaborador Honorario, Docente Grado 1 Interino, (12 horas semanales)
09/2009 - Actual, *Vínculo:* Ayudante de Química Computacional, Docente Grado 1 Interino, (20 horas semanales)

Actividades

03/2014 - 07/2014
Docencia , Grado
Modelado Molecular , Asistente , Curso electivo
03/2013 - 07/2013
Docencia , Grado
Modelado Molecular , Asistente , Curso electivo

03/2012 - 07/2012

Docencia , Grado

Modelado Molecular , Asistente , Curso electivo

08/2011 - 12/2011

Docencia , Grado

Fisicoquímica Molecular Básica , Asistente , Química

03/2011 - 07/2011

Docencia , Grado

Modelado Molecular , Asistente , Curso electivo

03/2010 - 07/2010

Docencia , Grado

Modelado Molecular , Asistente , Curso electivo

11/2009 - 12/2009

Docencia , Grado

Fisicoquímica Molecular Básica , Asistente , Carrera de Químico

03/2013 - 03/2015

Sistema Nacional de Investigadores

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , CCBG (DETEMA)/DQO

Motivos recurrentes en productos bioactivos: síntesis, predicción del perfil de actividad biológica e identificación basada en el ligando de nuevos compuestos con actividad biológica definida , Integrante del Equipo

03/2012 - 12/2012

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

Modelado por Homología mejorado de la Ciclohexanona Monooxigenasa de *Acinetobacter calcoaceticus* basado en moldes múltiples , Integrante del Equipo

07/2010 - 07/2011

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Química Computacional (CCBG) (DETEMA)

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

02/2009 - 06/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Química Computacional (CCBG) (DETEMA)

Estudio teórico del mecanismo de reacción de la condensación de Knoevenagel-Doebner , Integrante del Equipo

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

Vínculos con la institución

10/2012 - Actual, *Vínculo: Estudiante de Posgrado, (5 horas semanales)*

Actividades

Sistema Nacional de Investigadores

10/2012 - Actual

Líneas de Investigación , Area Química

Nuevos blancos para nuevos antibióticos: predicción de poli-farmacología de inhibidores de Sortasa A , Integrante del Equipo

Goteborgs Universitet , Suecia

Vínculos con la institución

09/2014 - 11/2014, *Vínculo: , (30 horas semanales)*

11/2014 - Actual, *Vínculo: , (1 horas semanales)*

Lineas de investigación

Título: Nuevos blancos para nuevos antibióticos: predicción de poli-farmacología de inhibidores de Sortasa A

Tipo de participación: Integrante del Equipo

Equipos: Patricia Saenz Méndez(Integrante); Leif Axel Eriksson(Integrante)

Palabras clave: Sortasa A; Poli-farmacología; Antibioticos

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

Química Teórica

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

Bioinformática

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

Proyectos

2009 - 2010

Título: Estudio teórico del mecanismo de reacción de la condensación de Knoevenagel-Doebner, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Estas reacciones han mostrado una enorme versatilidad sintética y el curso de las mismas es altamente dependiente del reactivo particular, pudiendo ocurrir una única descarboxilación (para dar derivados de ácidos cinámicos) o una doble descarboxilación (para dar derivados de estireno). Hasta el momento no se ha descrito un mecanismo que explique los resultados experimentales. El estudio teórico llevado a cabo plantea elucidar el mecanismo de la reacción mencionada. Los resultados obtenidos constituyen un manuscrito que fue publicado.

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Pregrado),

Equipo: Patricia Saenz Méndez(Responsable); Eduardo Bermúdez(Integrante)

Financiadores: Sin financiamiento

Palabras clave: Química computacional; Química Teórica; Knoevenagel-Doebner; DFT

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

Química Teórica

2010 - 2011

Título: Diseño computacional de reacciones multicomponente y dominó para la síntesis de productos naturales y farmacéuticos, *Descripción:* La química orgánica ha evolucionado de una forma fascinante en las últimas décadas. Uno de los objetivos más relevantes es el desarrollo de nuevos procedimientos altamente selectivos que permitan la preparación de moléculas complejas con excelentes regio-, quimio- y enantioselectividad, y eficiencia elevada. Una estrategia sintética ideal, involucra la formación de varios enlaces secuencialmente sin necesidad de aislar intermedios, simplemente modificando las condiciones de reacción o incorporando nuevos reactivos. En este contexto las reacciones multicomponente y dominó emergen como una aproximación muy prometedora para la preparación de moléculas estructuralmente complejas. Un desafío adicional para la química orgánica sintética es el diseño de estrategias que permitan obtener bibliotecas de compuestos de alto valor agregado, ya sea por su actividad biológica potencial o por su posterior utilidad como bloque de construcción. En el marco de una línea de trabajo que apunta al diseño de reacciones multicomponente y dominó para la síntesis de tales motivos recurrentes de alto valor, orientamos nuestra investigación al desarrollo de metodologías eficientes en síntesis orientada a la diversidad. En este contexto, este proyecto plantea el estudio teórico-computacional de estas reacciones con el fin último de elucidar los mecanismos, establecer las mejores condiciones a utilizar en el laboratorio y diseñar nuevas reacciones y/o catalizadores.

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Pregrado),

Equipo: Patricia Saenz Méndez(Responsable); Eduardo Bermúdez(Integrante)

Financiadores: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

Palabras clave: Química Teórica; Química computacional; Multicomponente; Dominó; DFT

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

Química Teórica

2012 - 2012

Título: Modelado por Homología mejorado de la Ciclohexanona Monooxigenasa de *Acinetobacter calcoaceticus* basado en moldes múltiples, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Se derivó en un nuevo modelo por homología de la Ciclohexanona Monooxigenasa (CHMO) de *Acinetobacter calcoaceticus* partiendo de varios moldes previos principalmente la estructura cristalográfica obtenida de *Rhodococcus* sp. El nuevo modelo fue verificado demostrando que la nueva estructura obtenida es mejor que las ya existentes, especialmente debido a que la misma incluye el cofactor nicotinamida que no había sido incluido en las anteriores. Esto permitió explicar la unión de dicho cofactor y la estabilización de los intermedios durante la reacción de Baeyer-Villiger.

Tipo: Investigación

Alumnos:

Equipo: Oscar N. Ventura(Integrante); Eduardo Bermúdez(Integrante); Leif A. Eriksson(Integrante); Patricia Saenz-Méndez(Responsable)

Palabras clave: Modelado por Homología; ciclohexanona monooxigenasa; CHMO; *Acinetobacter calcoaceticus*; cofactor nicotinamida;

Bioinformática

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

2013 - 2015

Título: Motivos recurrentes en productos bioactivos: síntesis, predicción del perfil de actividad biológica e identificación basada en el ligando de nuevos compuestos con actividad biológica definida, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Históricamente, el descubrimiento de fármacos, se ha basado en la detección fortuita de actividad biológica en ciertas clases de compuestos a medida que se encuentran bajo investigación ("serendipity" es el término empleado en inglés). Así, hacer más eficiente el proceso de descubrimiento de fármacos, es un desafío que sigue vigente. La necesidad de desarrollar fármacos seguros e innovadores, reduciendo el tiempo y costo del proceso, ha desviado la atención hacia el mejoramiento de las fases tempranas proceso: la identificación y optimización de líderes (fallar temprano, fallar rápido y fallar barato). Mientras que el tamizado de alto rendimiento (HTS, High-Throughput-Screening) de grandes bibliotecas de compuestos es aún el principal punto de partida para el descubrimiento de candidatos en la industria farmacéutica, el tamizado virtual ha incrementado su impacto en el proceso de identificación de fármacos líderes. En este sentido, existen diferentes estrategias alternativas para la identificación in silico de diferentes fármacos. La estrategia computacional puede estar basada en el blanco biomolecular (proteína, ácido nucleico), para lo que se requiere información estructural derivada de experimentos de RMN o difracción de rayos X idealmente; o de modelos por homología. Esta estrategia, consiste en buscar en una biblioteca de moléculas pequeñas a aquellos compuestos que muestran actividad contra una única y conocida diana biológica, por eso se dice que está basada en el blanco biomolecular. Si bien las técnicas de docking son procesos demandantes desde el punto de vista computacional, brindan información interesante respecto a la interacción ligando-receptor, que es muy valiosa a la hora de diseñar análogos que mimeticen o antagonicen la acción de compuestos conocidos. Otro enfoque completamente distinto, es el diseño basado en el ligando. El objetivo es identificar la diana biomolecular (de entre una biblioteca de blancos biomoleculares) para una única entidad química, lo que se conoce como "pescar el blanco" ("target fishing"). Este enfoque se fundamenta en el principio de las propiedades similares, que establece que moléculas que son similares tienen actividad biológica similar. Es posible adicionalmente, emplear descriptores moleculares, di- y tridimensionales (2D y 3D, respectivamente). Estos descriptores incluyen información como las cargas atómicas parciales, solubilidad en agua, volumen, potencial de ionización, potencial electrostático, etc. Estas propiedades son esenciales para comprender la actividad biológica y racionalizar los requerimientos para mejorarla. Esta será la estrategia empleada en este Proyecto: detectar para cada uno de los productos a ser sintetizados su perfil de actividad biológica y determinar descriptores que permitan establecer relaciones-estructura-actividad. Evidentemente, ambas estrategias mencionadas (basadas en el blanco biomolecular o en el ligando) pueden ser combinadas, obteniendo más información, la que incluye un modelo del farmacóforo y modelos más precisos de relación estructura química-actividad biológica. Esta estrategia combinada se llevará a cabo en aquellos casos donde los datos disponibles (estructura de potenciales receptores) lo permitan.

Tipo: Investigación

Alumnos:

Equipo: Eduardo Bermúdez(Integrante); Patricia Saenz-Méndez(Responsable); Virginia Aldabalde(Integrante); Mariela Rizzo(Integrante)

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

Palabras clave: Motivos recurrentes en productos bioactivos; Target fishing

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis y Caracterización

Producción científica/tecnológica

El incremento de infecciones con microorganismos resistentes a antibióticos es un fenómeno alarmante. En particular, las infecciones con bacterias Gram-positivas como *Staphylococcus aureus* resistente a meticilina, representan un desafío mayor para la medicina. La creciente generación de resistencia a los antibióticos disponibles debe impedirse promoviendo la innovación en el desarrollo de nuevos fármacos antimicrobianos. Un campo en el cual no se han generado nuevos descubrimientos desde el año 1987. Frecuentemente, el proceso que va desde el descubrimiento de un fármaco a su comercialización requiere de entre 15 y 20 años de investigación y el ensayo preliminar de unos 10.000 candidatos, lo que conlleva un gasto superior a 500 millones de euros. Aproximadamente la tercera parte del costo y tiempo totales se invierte en el descubrimiento de líderes sobre los cuales se ensayan modificaciones tendientes a mejorar sus propiedades. Esto posiciona a la química medicinal a la vanguardia de la innovación farmacéutica. El constante esfuerzo en investigación y desarrollo de la industria farmacéutica, en particular enfocado en nuevas estrategias como la bioinformática, generará medicamentos que actúen sobre nuevas dianas biológicas y permitan avanzar en la lucha contra las enfermedades infecciosas. De acuerdo a un informe de la Organización Mundial de la Salud realizado en 2014, la resistencia a antibióticos es un problema sanitario mundial. Esto significa que si no se inician acciones urgentes, enfrentaremos una era post-antibióticos, en la cual infecciones comunes pueden volver a ocasionar muertes del mismo modo que lo hacían hasta el descubrimiento de la penicilina a principios del siglo pasado. Resulta indispensable entonces, desarrollar nuevos antibióticos para asegurar la disponibilidad de tratamientos eficaces contra infecciones bacterianas y que a la vez no desplieguen efectos no deseados. Esto es posible si se selecciona una diana terapéutica adecuada, recurriendo a técnicas que permitan el diseño eficiente y la detección temprana de efectos colaterales. Sortasa A (SrtA) es una enzima esencial para la elevada patogenicidad de las bacterias Gram-positivas, frecuentemente responsables de listeriosis, neumonía e infecciones

oportunistas. Así, el descubrimiento de inhibidores de SrtA no-tóxicos es un campo de avanzada en la investigación en química medicinal, ya que se sugiere que tales antibióticos no generarían una resistencia tan marcada. En nuestro trabajo, se desarrollan pequeñas moléculas activas contra SrtA, empleando técnicas computacionales tradicionales. Adicionalmente, se emplea la técnica de docking inverso de forma de detectar nuevas dianas para esos potenciales antibióticos. Permitiendo de este modo determinar la poli-farmacología de los nuevos candidatos a antibióticos, con el objetivo que los mismos no generen resistencia y no presenten efectos tóxicos en humanos. El desarrollo de nuevos antibióticos eficientes y con menor resistencia permitirá reducir los varios millones de muertes que se producen anualmente a causa de infecciones curables mediante agentes antimicrobianos.

Producción bibliográfica

Artículos publicados

Arbitrados

Completo

E. BERMUDEZ; OSCAR N. VENTURA; LEIF A. ERIKSSON; PATRICIA SAENZ MÉNDEZ

Improved homology model of cyclohexanone monooxygenase from Acinetobacter calcoaceticus based on multiple templates. Computational Biology and Chemistry, v.: 49, p.: 14 - 22, 2014

Palabras clave: *Bioinformática; Modelo por Homología; Ciclohexanona Monooxygenasa*

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

Química teórica

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

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

Bioinformática

Medio de divulgación: *Papel*; ISSN: 14769271; DOI: 10.1016/j.compbiolchem.2014.01.012

<http://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S1476927114000140?showall=true>



SCOPUS



Completo

E. BERMUDEZ; PATRICIA SAENZ MÉNDEZ; OSCAR N. VENTURA

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

Palabras clave: *DFT; Knoevenagel-Doebner; Química Teórica*

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

Medio de divulgación: *Papel*; ISSN: 10895639; DOI: 10.1021/jp109703f

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



SCOPUS



Artículos aceptados

Sistema Nacional de Investigadores

Otros datos relevantes

Presentaciones en eventos

Congreso

Presentación de Poster ENAQUI , 2013

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Encuentro nacional de Química (ENAQUI); *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA-Química

Palabras clave: Bioinformática; Modelo por Homología; ciclohexanona monooxigenasa; Acinetobacter calcoaceticus

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

Modelo por homología de ciclohexanona monooxigenasa de Acinetobacter calcoaceticus basado en moldes múltiples Eduardo Bermúdez, Oscar N. Ventura, Leif A. Eriksson y Patricia Saenz-Méndez

Congreso

Presentación de Poster ACS Summer School on Green Chemistry and Sustainable Energy , 2012

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Estados Unidos; *Nombre del evento:* ACS Summer School on Green Chemistry and Sustainable Energy; *Nombre de la institución promotora:* American Chemical Society

Palabras clave: ACS Summer School

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

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

Química computacional

Congreso

Presentación como co-autor Poster QUITEL XXXVIII , 2012

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Brasil; *Nombre del evento:* XXXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2012);

Palabras clave: Bioinformática; Modelo por Homología; ciclohexanona monooxigenasa; Acinetobacter calcoaceticus

Ciclohexanona monooxigenasa de Acinetobacter calcoaceticus: modelo por homología basado en moldes múltiples Patricia Saenz-Méndez, Eduardo Bermúdez, Oscar N. Ventura y Leif A. Eriksson

Congreso

Presentación de Poster ENAQUI , 2011

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Encuentro nacional de Química (ENAQUI); *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA-Química

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

Diseño computacional de reacciones multicomponente para la síntesis motivos estructurales recurrentes en productos naturales. Eduardo Bermúdez, Oscar N. Ventura y Patricia Saenz Méndez.

Congreso

Presentación de Poster SINAQO XVIII , 2011

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* Simposio Nacional de Química Orgánica (SINAQO); *Nombre de la institución promotora:* SAIQO

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

Diseño Computacional de reacciones multicomponente para la síntesis de Productos naturales y farmacéuticos Eduardo Bermúdez, Oscar N. Ventura y Patricia Saenz Méndez.

Indicadores de producción

<i>Producción bibliográfica</i>	2
<i>Artículos publicados en revistas científicas</i>	2
Completo (Arbitrada)	2
<i>Artículos aceptados para publicación en revistas científicas</i>	0
<i>Trabajos en eventos</i>	0
<i>Libros y capítulos de libros publicados</i>	0
<i>Textos en periódicos</i>	0
<i>Documentos de trabajo</i>	0
<i>Producción técnica</i>	0
<i>Productos tecnológicos</i>	0
<i>Procesos o técnicas</i>	0
<i>Trabajos técnicos</i>	0
<i>Otros tipos</i>	0
<i>Evaluaciones</i>	0

<i>Formación de RRHH</i>	<i>0</i>
<i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</i>	<i>0</i>
<i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha</i>	<i>0</i>

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores