



# Curriculum Vitae

## Jenner BONANATA SILVA

Actualizado: 29/05/2017



Publicado: 20/07/2017

**Sistema Nacional de Investigadores**

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas

Categorización actual: Iniciación

Ingreso al SNI: Activo(01/06/2016)

## Datos generales

### Información de contacto

E-mail: jbonanata@fcien.edu.uy

Teléfono: 099126160

Dirección: Avenida 8 de octubre 3435 bis apartamento 805

### Institución principal

Instituto de Química Biológica / Facultad de Ciencias - UDeLaR / Universidad de la República / Uruguay

### Dirección institucional

Dirección: Facultad de Ciencias - UDeLaR / Iguá 4225 / 11400 / Montevideo / Montevideo / Uruguay

Teléfono: (+598) 25258618

Fax: 25224185

E-mail/Web: jbonanata@fcien.edu.uy / http://www.lqtc.fcien.edu.uy

## Formación

### Formación concluida

#### Formación académica/Titulación

##### Posgrado

2011 - 2013

Maestría

Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

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

Título: Aproximación teórica y experimental a algunas propiedades del tiol de la albumina y sus derivados (Salto a doctorado 19/12/13)

Tutor/es: Dra. E. Laura Coitiño, Dra. Beatriz Álvarez

Obtención del título: 2013

Becario de: Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay

Palabras clave: Tioles; Albúmina; QM/MM

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

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

##### Grado

2005 - 2011

Grado

Licenciatura en Bioquímica

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

*Título:* Modelado de la formación de radicales del sustrato en el sitio activo de la etanolamina amonio liasa

*Tutor/es:* Elena Laura Coitiño Izaguirre

*Obtención del título:* 2011

*Sitio web de la Tesis:* <http://iqb.fcien.edu.uy/>

*Palabras clave:* DFT; Catálisis radical; Abstracción de hidrógeno

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

## Formación en marcha

### Formación académica/Titulación

#### Posgrado

2013

Doctorado

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

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

*Título:* El títol de la albúmina sérica humana y sus modificaciones: abordaje mixto computacional-experimental

*Tutor/es:* Dra. E. Laura Coitiño, Dra. Beatriz Álvarez

*Becario de:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación , Uruguay

*Palabras clave:* Albúmina; QM/MM; Tioles; Especies reactivas del oxígeno

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

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

## Formación complementaria

### Cursos corta duración

11 / 2015 - 11 / 2015

VIII POSLATAM Course: Membrane lipids, transporters, channels... and all that crosstalk

Centro Universitario Región Litoral Norte , Universidad de la República , Uruguay

*Palabras clave:* Proteínas de membrana; Simulaciones moleculares; Lípidos de membrana; Interacciones lípido-proteína

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biología estructural

08 / 2013 - 12 / 2013

Química Inorgánica Avanzada

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

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Inorgánica

04 / 2013 - 06 / 2013

Modificaciones postraduccionales de proteínas

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

*Palabras clave:* Proteínas

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

11 / 2012 - 12 / 2012

Mass spectrometry in proteomics

Institut Pasteur de Montevideo, Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay

*Palabras clave:* Espectrometría de masas; Proteómica

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

09 / 2012 - 10 / 2012

Fundamentos y aplicaciones biológicas de la fluorescencia

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

*Palabras clave:* Fluorescencia

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

11 / 2011 - 12 / 2011	Herramientas Bioinformáticas para el Estudio de Proteínas Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay <i>Palabras clave:</i> Bioinformática; Proteínas <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática
08 / 2011 - 12 / 2011	Introducción a la computación Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay <i>Palabras clave:</i> Linux; Fortran; Programación <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática
08 / 2011 - 08 / 2011	Simulación computacional avanzada en Química, Bioquímica y Ciencias de los Materiales Universidad de Buenos Aires , Argentina <i>Palabras clave:</i> Modelado computacional; Simulación montecarlo; Dinámica molecular; Simulación computacional <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
03 / 2011 - 04 / 2011	Redox chemistry and biology of thiols Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay <i>Palabras clave:</i> Tioles; Radicales libres; Stress oxidativo; Vías de señalización <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular / Enzimología

### Otras instancias

2010	Seminarios <i>Nombre del evento:</i> Jornadas de Seminarios del IQB <i>Institución organizadora:</i> Instituto de Química Biológica - Facultad de Ciencias - UdeLaR , Uruguay  <i>Palabras clave:</i> Bioquímica <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular
2016	Congresos <i>Nombre del evento:</i> 10th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications <i>Institución organizadora:</i> Universitat Jaume I , España <i>Palabras clave:</i> DFT; QM/MM; Estructura electrónica <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
2016	Congresos <i>Nombre del evento:</i> XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina <i>Institución organizadora:</i> Universidad de la República , Uruguay <i>Palabras clave:</i> DFT; Química cuántica; Dinámica molecular; Modelado Computacional <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
2015	Congresos <i>Nombre del evento:</i> Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions <i>Institución organizadora:</i> International Centre for Genetic Engineering and Biotechnology , Uruguay  <i>Palabras clave:</i> Tioles; Redox <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Química y biología redox
2015	Congresos <i>Nombre del evento:</i> Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology/3as Jornadas de +Biofísica <i>Institución organizadora:</i> Latin American Federation of Biophysical Societies , Uruguay <i>Palabras clave:</i> Proteínas de membrana; Lípidos de membrana; Interacciones lípido-proteína; Simulaciones moleculares <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica
2014	Congresos <i>Nombre del evento:</i> 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists <i>Institución organizadora:</i> World Association of Theoretical and Computational Chemists , Chile  <i>Palabras clave:</i> Química cuántica; Dinámica molecular; DFT

- 2013  
*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional  
 Congresos  
*Nombre del evento:* VIII Meeting of the Society Free Radical Biology and Medicine-South American Group  
*Institución organizadora:* Society Free Radical Biology and Medicine-South American Group , Argentina  
*Palabras clave:* Radicales libres  
*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biología de radicales libres
- 2013  
 Congresos  
*Nombre del evento:* 3er Encuentro Nacional de Ciencias Químicas  
*Institución organizadora:* PEDECIBA Química , Uruguay  
*Palabras clave:* Química  
*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica
- 2013  
 Congresos  
*Nombre del evento:* 2as Jornadas de +Biofísica  
*Institución organizadora:* Sociedad Uruguaya de Biofísica , Uruguay  
*Palabras clave:* Biofísica  
*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica
- 2012  
 Congresos  
*Nombre del evento:* XIV Jornadas de la SUB  
*Institución organizadora:* Sociedad Uruguaya de Biociencias , Uruguay  
*Palabras clave:* Bioquímica  
*Áreas del conocimiento:* Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular
- 2012  
 Congresos  
*Nombre del evento:* 1as Jornadas de +Biofísica  
*Institución organizadora:* Sociedad Uruguaya de Biofísica , Uruguay  
*Palabras clave:* Biofísica  
*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biología estructural
- 2011  
 Congresos  
*Nombre del evento:* Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas  
*Institución organizadora:* Universidad de la República , Uruguay  
*Palabras clave:* Química  
*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica

## Construcción institucional

# Sistema Nacional de Investigadores

## Idiomas

- Español  
 Entiende (Muy Bien) / Habla (Muy Bien) / Lee (Muy Bien) / Escribe (Muy Bien)
- Inglés  
 Entiende (Bien) / Habla (Regular) / Lee (Muy Bien) / Escribe (Bien)
- Italiano  
 Entiende (Muy Bien) / Habla (Bien) / Lee (Muy Bien) / Escribe (Bien)
- Portugués  
 Entiende (Bien) / Habla (Regular) / Lee (Bien) / Escribe (Regular)

## Áreas de actuación

- Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional
- Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular / Enzimología

## Cargos desempeñados actualmente

Desde: 05/2016  
Ayudante de Química Teórica y Computacional , (Docente Grado 1 Interino, 20 horas semanales) , Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

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

### Vínculos con la institución

09/2009 - 12/2009, *Vínculo:* Ayudante de Química Teórica y Computacional, Docente Grado 1 Interino, (20 horas semanales)

03/2009 - 09/2009, *Vínculo:* Investigador Honorario, No docente (10 horas semanales)

01/2010 - 06/2010, *Vínculo:* Investigador Honorario, No docente (15 horas semanales)

07/2011 - 02/2012, *Vínculo:* Investigador Honorario, No docente (20 horas semanales)

*07/2010 - 06/2011, Vínculo: Becario ININ (ANII), No docente (20 horas semanales)*

*03/2012 - 02/2014, Vínculo: Becario de Maestría - ANII, No docente (30 horas semanales)*

*03/2014 - 08/2016, Vínculo: Becario de Doctorado - ANII, No docente (30 horas semanales)*

11/2015 - 12/2015, *Vínculo:* Asistente de Química Teórica y Computacional, Docente Grado 2 Interino, (20 horas semanales)

05/2016 - Actual, *Vínculo:* Ayudante de Química Teórica y Computacional, Docente Grado 1 Interino, (20 horas semanales)

### Actividades

08/2016 - 12/2016

Docencia , Grado

Fisicoquímica Moderna - Estructura y Propiedades moleculares , Asistente , Licenciatura en Bioquímica

08/2010 - 12/2010

Docencia , Grado

Fisicoquímica Moderna - Estructura y Propiedades Moleculares , Invitado , Licenciatura en Bioquímica

11/2016 - 11/2016

Docencia , Perfeccionamiento

Termoquímica y Cinética Computacional , Asistente , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

11/2016 - 12/2016

Docencia , Doctorado

Predicción y análisis in silico de la estructura e interacciones de proteínas , Asistente , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

09/2016 - 09/2016

Extensión , Facultad de Ciencias , Instituto de Química Biológica

Latitud Ciencias 2016

07/2013 - 07/2013

Extensión , Facultad de Ciencias , Instituto de Química Biológica

Latitud Ciencias 2013

03/2017 - Actual

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

Sulfuro-quinona oxidoreductasa: Buscando las causas de la extraordinaria aceleración de una reacción química , Coordinador o Responsable

04/2014 - 10/2015

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

Efectos de la glicación por metilglicoxal sobre propiedades de la albúmina humana y su tiol libre , Coordinador o Responsable

04/2012 - 04/2012

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

Aproximación teórica y experimental a propiedades del tiol de la albúmina sérica humana , Coordinador o Responsable

## Universidad de Buenos Aires , Argentina

### Vínculos con la institución

09/2015 - 10/2015, *Vínculo:* Pasante de investigación, (30 horas semanales)

### Actividades

09/2015 - 10/2015

Pasantías , Facultad de Ciencias Exactas y Naturales , Grupo de modelado molecular

Capacitación en simulaciones de dinámica molecular QM/MM con LIO/AMBER

## Universidad Autónoma de Barcelona , España

### Vínculos con la institución

05/2016 - 06/2016, *Vínculo:* Pasante de investigación, (30 horas semanales)

### Actividades

05/2016 - 06/2016

Pasantías , Departament de Química , Dinàmica i mecanismes de les reaccions químiques i bioquímiques

Modelado QM/MM de la reacción del ácido sulfénico de la albúmina sérica humana con peróxido de hidrógeno

### Proyectos

2017 - Actual

*Título:* Sulfuro-quinona oxidoreductasa: Buscando las causas de la extraordinaria aceleración de una reacción química, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Aunque el sulfuro de hidrógeno (H<sub>2</sub>S) ha sido considerado tradicionalmente como un gas tóxico, en las últimas décadas se han identificado papeles señaladores que modulan procesos fisiológicos en mamíferos, además de ser sintetizado y oxidado por éstos. El H<sub>2</sub>S puede reaccionar con disulfuros y ácidos sulfénicos (derivados oxidados de tioles) formando persulfuros, especies en general de vida corta, con carácter tanto nucleófilo como electrófilo, involucradas en el metabolismo del H<sub>2</sub>S, el transporte de azufre y en la catálisis enzimática. En mamíferos, la oxidación del H<sub>2</sub>S se da fundamentalmente en la mitocondria, y el primer paso de ésta está catalizado por la sulfuro-quinona oxidoreductasa (SQR), enzima que cataliza la oxidación del H<sub>2</sub>S acoplada a la reducción de ubiquinona, usando FAD como cofactor. En algunas bacterias, SQR que cataliza la formación de polisulfuros y azufre elemental, mientras que en mamíferos la SQR requiere un sustrato adicional, como glutatión, H<sub>2</sub>S o sulfito, para producir glutatión persulfuro, H<sub>2</sub>S<sub>2</sub> o tiosulfato. Los mecanismos de las diferentes SQR tienen la misma primera etapa, el ataque nucleofílico del H<sub>2</sub>S, más precisamente SH<sup>-</sup>, sobre un disulfuro ubicado en el sitio activo, para dar un tiolato y un persulfuro. Este proceso en la SQR sufre una aceleración extraordinaria: ocurre 5-7 órdenes de magnitud más rápido que en disulfuros de bajo peso molecular. En este proyecto se plantea, mediante modelado QM/MM, estudiar la oxidación de H<sub>2</sub>S en el sitio activo de las SQR, para determinar qué causa tan extraordinaria aceleración. Asimismo se plantea comprender mejor la química de los persulfuros.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:*

*Equipo:* Elena Laura COITIÑO IZAGUIRRE(Integrante); Beatriz ÁLVAREZ SANNA(Integrante)

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

*Palabras clave:* Catabolismo del sulfuro de hidrógeno; Persulfuros; Tioles biológicos

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

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

2012 - 2012

*Título:* Aproximación teórica y experimental a propiedades del tiol de la albúmina sérica humana, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* La albúmina sérica humana (HSA) es la proteína plasmática más abundante, representando un 60% del total de proteínas en plasma. Posee 17 puentes disulfuro y un solo residuo de cisteína libre, Cys34, que representa el 80% del total de tioles libres en plasma. El valor de pKa de este tiol es controversial y podría estar afectado por cambios conformacionales en la proteína. El tiolato reacciona con oxidantes como peróxido de hidrógeno y peroxinitrito para formar un ácido sulfénico relativamente estable, el cual constituye un buen modelo para estudiar las propiedades de intermediarios sulfénicos proteicos. El ácido sulfénico formado en la albúmina reacciona con otra molécula de peróxido de hidrógeno para formar ácido sulfínico y con tioles de bajo peso molecular para formar disulfuros mixtos. También decae espontáneamente en amortiguador fosfato, formando un producto aún no identificado, que podría ser una sulfenamida (L. Turell, Biochemistry 2008, 47, 358-367). En el presente proyecto se plantea realizar un abordaje mixto, experimental y teórico, integrando los esfuerzos de dos grupos de investigación diferentes ('Físicoquímica Biológica-Enzimología' 46725 y 'Química Teórica y Computacional de Sistemas Complejos-LQTC' 708725) para explorar algunas cuestiones relacionadas a las propiedades del tiol y su derivado ácido sulfénico.

Este doble abordaje permitirá realizar un diálogo de ida y vuelta entre el modelado computacional y los experimentos de laboratorio, fortaleciéndose y complementándose mutuamente, en el contexto de la realización de estudios de Posgrado. En concreto, se aplicará espectroscopía infrarroja para determinar el pKa del tiol y caracterizar los productos de oxidación. Asimismo, se explorarán los mecanismos de las reacciones del tiol y su derivado sulfénico con peróxido de hidrógeno. Considerando que las formas oxidadas de la albúmina están presentes in vivo y aumentan en diferentes patologías, y que la albúmina posee importancia farmacológica, es de esperar este proyecto permita comprender los mecanismos subyacentes a la oxidación del tiol e impacten a nivel biomédico y farmacéutico.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:*

*Equipo:* Laura Coitiño(Integrante); Beatriz Álvarez(Integrante); Jenner Bonanata(Responsable)

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

*Palabras clave:* Tioles; Albúmina; Redox

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

2014 - 2015

*Título:* Efectos de la glicación por metilglioxal sobre propiedades de la albúmina humana y su tiol libre, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* La albúmina sérica humana (HSA) es la proteína plasmática más abundante, representando un 60% del total de proteínas en plasma. Posee 17 puentes disulfuro y un solo residuo de cisteína libre, Cys34, que representa el 80% del total de tioles libres en plasma, y reacciona con oxidantes como peróxido de hidrógeno y peroxinitrito para formar ácido sulfénico, y con especies radicalarias para formar radicales tiolo. La glicación es un tipo de modificación -no enzimática- de las proteínas en la cual agentes glicantes (azúcares, oxoaldehídos) reaccionan con residuos de Arg, Lys y Cys formando aductos -productos intermedios y avanzados de glicación-. Estas modificaciones son irreversibles y alteran la estructura y función de las proteínas. El metilglioxal es un oxoaldehído altamente reactivo cuya concentración aumenta en diabetes. Dada su larga vida media (alrededor de 21 días) y su alta concentración, la HSA es un blanco importante de los agentes glicantes en plasma. La glicación altera las propiedades de la HSA, entre ellas su capacidad antioxidante. Esto puede deberse a cambios conformacionales que afecten la reactividad del tiol o a que este último reacciona con agentes glicantes. En el presente proyecto se plantea realizar un abordaje mixto, experimental y computacional, integrando los esfuerzos de dos grupos de investigación diferentes ('Físicoquímica Biológica-Enzimología' 46725 y 'Química Teórica y Computacional de Sistemas Complejos-LQTC' 708725) para explorar algunas cuestiones relacionadas a las propiedades de la HSA y su tiol cuando ésta es modificada por metilglioxal. Este doble abordaje permitirá realizar un diálogo de ida y vuelta entre el modelado computacional y los experimentos de laboratorio, complementándose mutuamente, en el contexto de la realización de estudios de Posgrado. En particular se realizarán experimentos de cinética para la actividad experimental, y cálculos de dinámica molecular y QM/MM para el modelado computacional. Se plantea estudiar las reacciones del tiol de la HSA -previamente expuesta a metilglioxal- con peróxidos y 5,5'-ditiobis(2-nitrobenzoato), y la reacción del tiol con metilglioxal para formar el aducto carboxietilcisteína. Considerando que las formas glicadas y oxidadas de la albúmina están presentes in vivo y aumentan en diferentes patologías, y que la albúmina posee importancia farmacológica, es de esperar este proyecto permita comprender los mecanismos subyacentes a la oxidación del tiol e impacten a nivel biomédico y farmacéutico.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:*

*Equipo:* Beatriz Álvarez(Integrante); Jenner Bonanata(Responsable); Elena Laura Coitiño(Integrante)

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

*Palabras clave:* Albúmina; Tioles biológicos; Glicación; Estrés oxidativo

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

## Producción científica/tecnológica

Comencé a realizar actividades de investigación en el Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC) del Instituto de Química Biológica (IQB) de la Facultad de Ciencias en el año 2009, donde realicé una pasantía de grado que consistió en el modelado computacional DFT de propiedades de una serie de dioxocomplejos de renio(V) con potencial valor radiofarmacéutico. Luego, realicé mi Tesis de Grado en el LQTC trabajando en el modelado DFT del mecanismo de la abstracción de hidrógeno de la etanolamina por el radical 5'-desoxiadenosilo, como modelo de la primera etapa de la reacción catalizada por la etanolamina amonio liasa (EAL). Como tema de Tesis de Doctorado (la cual se defenderá el presente año), y también en el marco de un proyecto CSIC, desde 2011 estoy trabajando en el estudio de propiedades del tiol de la albúmina sérica humana (HSA) y de su derivado, el ácido sulfénico, y de la interacción entre la oxidación del tiol y la glicación de la HSA. En este trabajo, en el cual se utilizó un enfoque mixto experimental-computacional, se emplearon una serie de técnicas experimentales (espectroscopía infrarroja, cinética química, cromatografía líquida de alta performance) y de modelado computacional (modelado DFT, dinámica molecular, QM/MM). Por otro lado, en paralelo estoy trabajando en el modelado QM/MM de la reacción catalizada por la EAL. En marzo de 2017, en el marco de un proyecto ANII-FCE, comencé a trabajar en el modelado QM/MM de la oxidación del sulfuro de hidrógeno catalizada por la sulfuro:quinona oxidorreductasa (SQR). La primera etapa de la

reacción catalizada por la SQR consiste en el ataque nucleofílico del anión hidrosulfuro sobre un disulfuro ubicado en el sitio activo, el cual es un proceso lento en sistemas de bajo peso molecular (cistina) pero en el sitio activo de la SQR es de 5 a 7 órdenes de magnitud más rápida. El modelado computacional de dicha reacción buscará explicar a qué se debe tan extraordinaria aceleración.

## Producción bibliográfica

### Artículos publicados

#### Arbitrados

##### Completo

BONANATA, J.; TURELL, L.; ANTMANN, L.; FERRER-SUETA, G.; BOTASINI, S.; MÉNDEZ, E.; ÁLVAREZ, B.; COITIÑO, E. L.

*The thiol of human serum albumin: acidity, microenvironment and mechanistic insights on its oxidation to sulfenic acid. Free Radical Biology and Medicine*, v.: 108, p.: 952 - 962, 2017

Palabras clave: Reactividad de cisteína; Enlace de hidrógeno; Albúmina sérica; Peróxido de hidrógeno; Tioles biológicos; Oxidación de tioles

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

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

Medio de divulgación: Papel ; Lugar de publicación: Holanda ; ISSN: 08915849 ; DOI: 10.1016/j.freeradbiomed.2017.04.021

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0891584917302241>



SCOPUS



##### Completo

CUEVASANTA, E.; LANGE, M.; BONANATA, J.; COITIÑO, E. L.; FERRER-SUETA, G.; FILIPOVIC, M. R.; ÁLVAREZ, B.

*Reaction of hydrogen sulfide with disulfide and sulfenic acid to form the strongly nucleophilic persulfide. Journal of Biological Chemistry*, 2015

Palabras clave: Sulfuro de hidrógeno; Disulfuros; Ácidos sulfénicos; Persulfuros; Tioles; Cinética

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

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

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

Medio de divulgación: Papel ; Lugar de publicación: Estados Unidos ; ISSN: 00219258 ; DOI: 10.1074/jbc.M115.672816

<http://www.jbc.org/content/early/2015/08/12/jbc.M115.672816.long>



SCOPUS



##### Completo

BONANATA, J.; SIGNORELLI, S.; COITIÑO, E. L.

*Increasing Complexity Models for Describing the Generation of Substrate Radicals at the Active Site of Ethanolamine Ammonia-Lyase/B12. Computational and Theoretical Chemistry*, v.: 975, p.: 52 - 60, 2011

Palabras clave: Etanolamina amonio liasa; Efectos del entorno proteico; Modelo continuo polarizable PCM; Catálisis por protonación; Cationes radicales distónicos; Modelado DFT

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

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

Medio de divulgación: Internet ; Lugar de publicación: Holanda ; ISSN: 2210271X ; DOI: 10.1016/j.comptc.2011.07.029

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X11004038>



SCOPUS



### Artículos aceptados

### Trabajos en eventos



Resumen

BONANATA, J.; COITIÑO, E. L.

QM/MM (ONIOM) study of the reaction catalyzed by ethanolamine ammonia lyase , 2016

*Evento:* Internacional , 10th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications , Castellón de la Plana, España , 2016

*Palabras clave:* QM/MM; DFT

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero; Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero; Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

Resumen

BONANATA, J.; ÁLVAREZ, B.; COITIÑO, E. L.

Effects of glycation of human serum albumin on the properties of its free thiol: A computational study , 2015

*Evento:* Internacional , Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions , Montevideo , 2015

*Palabras clave:* Dinámica molecular; Albúmina sérica; Glicación; Tioles

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

*Medio de divulgación:* Internet;

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca; Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

Resumen

DEAMBROSI, M.; BONANATA, J.; ÁLVAREZ, B.

Optimizing an HPLC chromatofocusing procedure for the analysis of oxidized human serum albumin , 2015

*Evento:* Internacional , Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions , Montevideo , 2015

*Palabras clave:* Cromatografía; Albúmina sérica; Oxidación de tioles

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

*Medio de divulgación:* Internet;

Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero; Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

Resumen

BONANATA, J.; PORTILLO-LEDESMA, S.; ÁLVAREZ, B.; COITIÑO, E. L.

Protein Sulfenic Derivatives in a Redox Crossroad: Mechanistic Insights from Representative Models of Oxidation by H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> and Reduction by Ascorbate , 2015

*Evento:* Internacional , Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions , Montevideo , 2015

*Palabras clave:* Oxidación de tioles; Redox; Tioles; QM/MM; Química cuántica

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

*Medio de divulgación:* Internet;

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca; Comisión Académica de Posgrado / Beca

## Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

BONANATA, J.; ÁLVAREZ, B.; COITIÑO, E. L.

Effects of Cys34 S-cysteinylation on the tendency to glycate of Arg/Lys residues in human serum albumin , 2015

*Evento:* Internacional , Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology , Salto, Uruguay , 2015

*Palabras clave:* Simulaciones moleculares; Dinámica molecular; QM/MM

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca; Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero; Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

<http://masbiofisica.fcien.edu.uy/>

Resumen

ORTIZ, F.; BONANATA, J.; COITIÑO, E. L.

In silico approach to Human Serum Albumin (HSA) early glycation mechanism , 2015

*Evento:* Internacional , Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology , Salto, Uruguay

*Palabras clave:* DFT; QM/MM; Dinámica molecular

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

*Medio de divulgación:* Papel;

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

<http://masbiofisica.fcien.edu.uy/>

Resumen

ORTIZ, F.; BONANATA, J.; COITIÑO, E. L.

Aportando piezas clave para entender el mecanismo de apertura de la glucopiranososa en seroalbúmina humana , 2014

*Evento:* Nacional , XV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Piriápolis , 2014

*Palabras clave:* Glicación de Proteínas; Catálisis; Modelado computacional; DFT

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

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

Resumen

PÉREZ-ESCANDA, D.; SAGASTI, C.; BONANATA, J.; COITIÑO, E. L.

Profundizando en el conocimiento del mecanismo de la reacción de Michael entre nitroalquenos del ácido oleico y tioles , 2014

*Evento:* Nacional , XV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Piriápolis , 2014

*Palabras clave:* Nitroalquenos; Tioles; DFT; Electrófilos

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

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

BONANATA, J.; ÁLVAREZ, B.; COITIÑO, E. L.

Modeling the reaction mechanism of sulfenic acid oxidation by hydrogen peroxide , 2014

*Evento:* Internacional , 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists , Santiago de Chile , 2014

*Palabras clave:* Oxidación de tioles; Ácidos sulfénicos; Especies reactivas del oxígeno; DFT

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

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

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

Resumen

BONANATA, J.; ÁLVAREZ, B.; COITIÑO, L.

Human serum albumin thiol protonation state and oxidation by hydrogen peroxide: A mixed experimental and computational approach , 2013

*Evento:* Internacional , VIII Meeting of the Society Free Radical Biology and Medicine-South American Group , Buenos Aires , 2013

*Palabras clave:* Albúmina; Tioles biológicos; Redox

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

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca; Institución del exterior / Society Free Radical Biology and Medicine / Apoyo financiero; Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Resumen

BONANATA, J.; ÁLVAREZ, B.; COITIÑO, L.

Sobreoxidación de tioles biológicos: Estudio computacional de la reacción de sulfenato (RSO-) con H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> , 2013

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

*Palabras clave:* Tioles biológicos; Redox

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

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

Resumen

BONANATA, J.; ÁLVAREZ, B.; COITIÑO, L.

Elucidación del mecanismo de sobreoxidación de la albúmina sérica humana por H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> por modelado computacional y FT-IR , 2013

*Evento:* Nacional , 2as Jornadas de +Biofísica , Montevideo , 2013

*Palabras clave:* Albúmina; Tioles biológicos; Redox

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

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

Resumen

BONANATA, J.; MÉNDEZ, E.; ÁLVAREZ, B.; COITIÑO, E. L.

Modelado computacional y estudio experimental de propiedades del tiol de la albúmina sérica humana , 2012

*Evento:* Nacional , XIV Jornadas de la SUB , Piriápolis , 2012

*Palabras clave:* Tioles; Redox; Albúmina; QM/MM; FT-IR

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

Resumen

BONANATA, J.; ÁLVAREZ, B.; COITIÑO, E. L.

Modelado computacional de la reacción del tiol libre de la albúmina sérica humana con H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> , 2012

*Evento:* Nacional , 1as Jornadas de +Biofísica , Montevideo , 2012

*Palabras clave:* Albúmina; Tioles biológicos; Redox; QM/MM

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

*Medio de divulgación:* Internet;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

Resumen

BONANATA, J.; COITIÑO, E. L.

Assessing the Nature of the Protein H-bond Network on Substrate's Transformation at the Active Site of EAL-B12 , 2011

*Evento:* Internacional , 5th Theoretical Biophysics International Symposium (TheoBio 2011) , Madeira, Portugal , 2011

*Palabras clave:* Enlace de hidrógeno; Catálisis radical; QM/MM; Liasas

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

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

## Resumen

BONANATA, J.; MERLINO, A.; CERDÁ, M. F.; COITIÑO, E. L.

Estudio comparado de la interacción ligando-proteína entre complejos [Re(V)O<sub>2</sub>L<sub>2</sub>]<sup>+</sup>1 (L = diamina alifática) y albúmina sérica de origen bovino y humano , 2011

*Evento:* Nacional , Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas , Montevideo , 2011

*Palabras clave:* Albúmina; Docking; Modelado por homología; Radiofarmacéuticos

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

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

## Resumen

COITIÑO, E. L.; BONANATA, J.; SIGNORELLI, S.

Increasing Complexity Models for Describing the Generation of Substrate Radicals at the Active Site of Ethanolamine Ammonia Lyase/B12 , 2010

*Evento:* Internacional , 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications , Oviedo, España , 2010

*Palabras clave:* Coenzima B12; Catálisis radical; Abstracción de hidrógeno; Liasas

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

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

## Resumen

BONANATA, J.; MERLINO, A.; CERDÁ, M. F.; COITIÑO, E. L.

In silico characterization of the interaction of a series of [ReO<sub>2</sub>L<sub>2</sub>]<sup>+</sup> complexes with serum albumin , 2010

*Evento:* Internacional , 1st International Conference on Bioinformatics SolBio 2010 , Chillán, Chile , 2010

*Palabras clave:* Albúmina; Complejos de coordinación; Bioinorgánica

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

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

## Resumen

COITIÑO, E. L.; BONANATA, J.; MERLINO, A.; MININI, L.; PITTINI, A.; PORTILLO, S.

Fomentando la metacognición y el desarrollo de pensamiento autónomo y crítico desde ambientes de aprendizaje cooperativo/colaborativo en Físicoquímica Moderna , 2010

*Evento:* Nacional , Foro de Innovaciones en Educación Superior , Montevideo, Uruguay , 2010

*Palabras clave:* Metacognición; Trabajo cooperativo

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

*Medio de divulgación:* Papel;

## Formación de RRHH

### Tutorías concluidas

#### Grado

*Tesis/Monografía de grado*

*Aportando piezas clave para entender el mecanismo de apertura de la glucopiranososa en seroalbúmina humana camino a su glicación temprana en Lys195 , 2016*

*Tipo de orientación:* Asesor/Orientador

*Nombre del orientado:* Federico Ortiz

*Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Bioquímica*

*Palabras clave:* Glicación; DFT; Modelado molecular

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

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

*Información adicional:* Nota final 12/12

## Otros datos relevantes

### Presentaciones en eventos

Congreso

QM/MM (ONIOM) study of the reaction catalyzed by ethanolamine ammonia lyase , 2016

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

*Referencias adicionales:* España; *Nombre del evento:* 10th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications; *Nombre de la institución promotora:* Universitat Jaume I

*Palabras clave:* DFT; Estructura electrónica; QM/MM

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

Congreso

Comparison between Additive and Subtractive QM/MM Schemes on the Reaction of Cys34 Sulfenate of HSA with H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> , 2016

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

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina; *Nombre de la institución promotora:* Universidad de la República

*Palabras clave:* QM/MM; Proteínas; Embedding; Oxidación de tioles

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

Congreso

Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology , 2015

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 36

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology; *Nombre de la institución promotora:* Latin American Federation of Biophysical Societies

*Palabras clave:* Interacciones lípido-proteína; Lípidos de membrana; Proteínas de membrana; Simulaciones moleculares

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

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

Congreso

Modeling the reaction mechanism of sulfenic acid oxidation by hydrogen peroxide , 2014

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 20

*Referencias adicionales:* Chile; *Nombre del evento:* 10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists; *Nombre de la institución promotora:* World Association of Theoretical and Computational Chemists

*Palabras clave:* Ácidos sulfénicos; Oxidación de tioles; Especies reactivas del oxígeno; Modelado computacional; DFT

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

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

Química Teórica y Computacional

Congreso

Human serum albumin thiol protonation state and oxidation by hydrogen peroxide: A mixed experimental and computational approach , 2013

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* VIII Meeting of the Society Free Radical Biology and Medicine-South American Group; *Nombre de la institución promotora:* Society Free Radical Biology and Medicine-South American Group

*Palabras clave:* Albúmina; Tioles biológicos; Biología redox

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

Congreso

Sobreoxidación de tioles biológicos: Estudio computacional de la reacción de sulfenato (RSO-) con H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> , 2013

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 3er Encuentro Nacional de Ciencias Químicas; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA Química

*Palabras clave:* Tioles biológicos; Redox

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

Congreso

Elucidación del mecanismo de sobreoxidación de la albúmina sérica humana por H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> por modelado computacional y FT-IR , 2013

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 2as Jornadas de +Biofísica; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Uruguaya de Biofísica

*Palabras clave:* Albúmina; Tioles biológicos; Redox

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

Congreso

Modelado computacional y estudio experimental de propiedades del tiol de la albúmina sérica humana , 2012

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 36

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* XIV Jornadas de la SUB;

*Palabras clave:* Tioles; Redox; QM/MM; Albúmina

*Areas del conocimiento:* Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular

Congreso

Modelado computacional de la reacción del tiol libre de la albúmina sérica humana con H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> , 2012

*Tipo de participación:* Expositor oral,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 1as Jornadas de +Biofísica; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Uruguaya de Biofísica

*Palabras clave:* Albúmina; QM/MM; Tioles biológicos

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

Congreso

Estudio comparado de la interacción ligando-proteína entre complejos [Re(V)O<sub>2</sub>L<sub>2</sub>]<sup>+1</sup> (L = diamina alifática) y albúmina sérica de origen bovino y humano , 2011

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 2º Encuentro Nacional de Ciencias Químicas; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA Química

*Palabras clave:* Albúmina; Docking molecular; DFT

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

Seminario

Modelado de la formación de radicales del sustrato en el sitio activo de la etanolamina amonio liasa , 2010

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 3

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Seminario del IQB; *Nombre de la institución promotora:* Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República

*Palabras clave:* DFT; Catálisis radical; Abstracción de hidrógeno

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

Simposio

Effects of glycation of human serum albumin on the properties of its free thiol: A computational study , 2015

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 16

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions; *Nombre de la institución promotora:* International Centre for Genetic Engineering and Biotechnology

*Palabras clave:* Tioles; Albúmina sérica; Glicación; Dinámica molecular

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

## Indicadores de producción

<i>Producción bibliográfica</i>	22
<i>Artículos publicados en revistas científicas</i>	3
Completo (Arbitrada)	3
<i>Artículos aceptados para publicación en revistas científicas</i>	0
<i>Trabajos en eventos</i>	19
Resumen (No Arbitrada)	19
<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>	<i>0</i>
<i>Trabajos técnicos</i>	<i>0</i>
<i>Otros tipos</i>	<i>0</i>
<i>Evaluaciones</i>	<i>0</i>
<i>Formación de RRHH</i>	<i>1</i>
<i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</i>	<i>1</i>
Tesis/Monografía de grado	1
<i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha</i>	<i>0</i>

## Sistema Nacional de Investigadores

## Sistema Nacional de Investigadores