



# Curriculum Vitae

## Margot PAULINO ZUNINI

Actualizado: 17/06/2017



Publicado: 20/07/2017

**Sistema Nacional de Investigadores**

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas

Categorización actual: Nivel II

Ingreso al SNI: Activo(01/03/2009)

## Datos generales

### Información de contacto

E-mail: margot@fq.edu.uy

Teléfono: +59829291558

Dirección: Avda General Flores 2124 11800-Montevideo Uruguay

### Institución principal

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

### Dirección institucional

Dirección: Facultad de Química - UDeLaR / Centro de Bioinformática Estructural - Departamento de Teoría y Estructura de la Materia y Afines / 11600 / Montevideo / Montevideo / Uruguay

Teléfono: (+02) 9291558

Fax: 9241906

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

## Formación

### Formación concluida

#### Formación académica/Titulación

##### Posgrado

1987 - 1993

Doctorado

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

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

Título: Relación estructura-actividad en compuestos nitro heterocíclicos con actividad tripanocida sobre Trypanosoma cruzi y otros tripanosomatídeos sensibles

Tutor/es: Andres Oscar Manuel Stoppani

Obtención del título: 1993

Palabras clave: t cruzi, bioinformatica farmacoquimica

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

##### Grado

1976 - 1982

Grado

Química Farmacéutica

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

Obtención del título: 1982

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química

## Formación complementaria

## Postdoctorado

- 2005 - 2006  
Estadías postdoctorales en el Trinity College Dublin  
Trinity College Dublin , Irlanda  
*Becario de:* Nacional Aeronautics and Space Administration , Estados Unidos  
*Palabras clave:* Chagas, nuevos fármacos  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / diseño de fármacos
- 2003 - 2004  
Pasantías Postdoctorales en el Center for Biophysical Sciences and Engineering  
University of Alabama at Birmingham , Estados Unidos  
*Becario de:* Nacional Aeronautics and Space Administration , Estados Unidos  
*Palabras clave:* trypanothione reductase  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Enfermedad de Chagas, Química Médica
- 2001 - 2001  
Pasantía posdoctoral en la Laurentian University, Laboratory of Theoretical Chemistry, Sudbury, Ontario  
Laurentian University , Canadá  
*Becario de:* Nacional Aeronautics and Space Administration , Estados Unidos  
*Palabras clave:* dinámica molecular  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural, Biomoléculas
- 1999 - 1999  
Estadía postdoctoral en el Departamento de Química UFSCar  
Universidad Federal de Sao Carlos , Brasil  
*Becario de:* Swedish International Development Agency , Suecia  
*Palabras clave:* dinámica molecular  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural, Biomoléculas
- 1999 - 1999  
Estadía postdoctoral en la Estación experimental del Zaidín e Instituto Lopez-Neira  
Instituto de Parasitología y Biomedicina 'López - Neyra' , España  
*Becario de:* Swedish International Development Agency , Suecia  
*Palabras clave:* bioinformática estructural  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural, Biomoléculas
- 1966 - 1999  
Pasantía postdoctoral.Physicochemical Department. Uppsala University  
Univerisdad de Uppsala , Suecia  
*Becario de:* Swedish International Development Agency , Suecia  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural
- 1996 - 1996  
Estadías postdoctorales de un mes en el IPP  
Institut Pasteur Paris , Francia  
*Becario de:* Nacional Aeronautics and Space Administration , Estados Unidos  
*Palabras clave:* Chagas, nuevos fármacos  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / microcalorimetría
- 1995 - 1995  
Pasantías postdoctorales.Physicochemical Department. Uppsala University  
Univerisdad de Uppsala , Suecia  
*Becario de:* Swedish International Development Agency , Suecia  
*Palabras clave:* bioinformática estructural  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural, Biomoléculas
- 1994 - 1994  
Pasantía postdoctoral en el Institut de Genetique et Microbiologie de la Universidad Paris Dus  
Francia  
Université Paris Sud (XI) , Francia  
*Becario de:* Swedish International Development Agency , Suecia  
*Palabras clave:* Aspergillus nidulans; DNA-CreA interactions  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-

1994 - 1994	<p>Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural Pasantía postdoctoral.Physicochemical Department. Uppsala University Univerisdad de Uppsala , Suecia</p> <p><i>Becario de:</i> Swedish International Development Agency , Suecia</p> <p><i>Palabras clave:</i> bioinformática estructural</p> <p><i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Biomoléculas</p>
1994 - 1994	<p>ETH,ZURICH Swiss Federal Institute of Technology in Zurich / Eidgenössische Technische Hochschule (ETH) Zürich , Suiza</p> <p><i>Becario de:</i> Swedish International Development Agency , Suecia</p> <p><i>Palabras clave:</i> structural bioinformatics</p> <p><i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular</p>
1994 - 1994	<p>Working Party on Computational Chemistry Université de Nancy 2 , Francia</p> <p><i>Becario de:</i> Swedish International Development Agency , Suecia</p> <p><i>Palabras clave:</i> computational chemistry</p> <p><i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular</p>

## Construcción institucional

En mi calidad de investigadora, docente y coordinadora de la Maestría en Bioinformática, he contribuído con la evolución y consolidación del Área Bioinformática y en particular, de la carrera de posgrado, la que cuenta al presente con 72 inscriptos, 30 egresados y 11 Magister en Bioinformática titulados por PEDECIBA-UdeLaR. Desde el 2013, y en forma ininterrumpida, soy responsable del Proyecto financiado por CAP-UDeLaR 'Maestría en Bioinformática' el cual sustenta junto con PEDECIBA la consolidación de la carrera. Dentro de mi especialidad (Bioinformática Estructural) he formado y dirijo el Área Bioinformática del Departamento DETEMA de la Facultad de Química.

## Idiomas

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

## Areas de actuación

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, Diseño de compuestos Bioactivos  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Farmacoquímica, Bioinformática Estructural

## Actuación Profesional

### Cargos desempeñados actualmente

<i>Desde:</i>	08/2014
	Profesor Titular , (Docente Grado 5 Titular, 40 horas semanales / Dedicación total) , Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay

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

## Vínculos con la institución

01/1985 - 12/1985, *Vínculo:* Prof. Adjunto Provisional de Química Cuántica, Docente Grado 3 Interino, (24 horas semanales)

01/1988 - 12/1988, *Vínculo:* Profesor Adjunto de Química Cuántica, Docente Grado 3 Interino, (36 horas semanales / Dedicación total)

04/1979 - 12/1982, *Vínculo:* Ayudante, Docente Grado 1 Interino, (15 horas semanales)

04/1983 - 12/1983, *Vínculo:* Asistente Honorario, Docente Grado 2 Honorario, (20 horas semanales)

02/1988 - 12/1989, *Vínculo:* Profesor Adjunto, Docente Grado 3 Titular, (40 horas semanales / Dedicación total)

*11/1991 - 11/1996, Vínculo: Profesor Adjunto de Química Cuántica. Efectiv, Docente Grado 4 Titular, (36 horas semanales / Dedicación total)*

06/1976 - 06/1977, *Vínculo:* Ayudante Honorario, Docente Grado 1 Interino, (20 horas semanales)

08/1977 - 08/1978, *Vínculo:* Ayudante Honorario, Docente Grado 1 Interino, (20 horas semanales)

08/1977 - 12/1977, *Vínculo:* Ayudante, Docente Grado 1 Interino, (8 horas semanales)

04/1978 - 12/1979, *Vínculo:* Ayudante de Físicoquímica, Docente Grado 1 Interino, (15 horas semanales)

01/1983 - 12/1984, *Vínculo:* Asistente, Docente Grado 2 Interino, (24 horas semanales)

01/1986 - 12/1986, *Vínculo:* Prof. Adjunto de Química Cuántica, Docente Grado 3 Interino, (24 horas semanales)

01/1987 - 12/1987, *Vínculo:* Profesor Adjunto de Química Cuántica, Docente Grado 3 Interino, (24 horas semanales)

*11/1989 - 11/1991, Vínculo: Profesor Adjunto de Química Cuántica. Efectiv, Docente Grado 1 Interino, (36 horas semanales / Dedicación total)*

11/1996 - 11/2001, *Vínculo:* Profesor Adjunto de Química Cuántica. Efectiv, Docente Grado 1 Interino, (36 horas semanales / Dedicación total)

*08/1997 - 08/1999, Vínculo: Profesor Agregado de Química Cuántica. Efecti, Docente Grado 1 Interino, (32 horas semanales / Dedicación total)*

08/1999 - 08/2004, *Vínculo:* Profesor Agregado de Química Cuántica. Efecti, Docente Grado 1 Interino, (32 horas semanales / Dedicación total)

08/2004 - 08/2009, *Vínculo:* Profesor Agregado de Química Cuántica. Efecti, Docente Grado 1 Interino, (32 horas semanales / Dedicación total)

08/2009 - 05/2014, *Vínculo:* Profesor Agregado de Química Cuántica. Efecti, Docente Grado 1 Interino, (32 horas semanales / Dedicación total)

08/2014 - Actual, *Vínculo:* Profesor Titular, Docente Grado 5 Titular, (40 horas semanales / Dedicación total)

## Actividades

10/2012 - Actual

Líneas de Investigación , Facultad de Química - UdeLaR , DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural

NUTRICAROT , Coordinador o Responsable

03/2010 - 00/

Líneas de Investigación , Facultad de Química , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

CREA.Estudio de la interacción con ADN de factores transcripcionales de *Aspergillus nidulans* , Coordinador o Responsable

06/2009 - 00/

Líneas de Investigación , Facultad de Química , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

FABLOCK. Estudios in silico de proteínas transportadoras de ácidos grasos de *Echinococcus granulosus* , Coordinador o Responsable

11/2004 - 00/

Líneas de Investigación , Facultad de Química - UdeLaR , DETEMA/Centro de Bioinformática Estructural

ABRESIST.Bioinformática estructural aplicada al estudio del mecanismo de resistencia de antibióticos quinolónicos , Coordinador o Responsable

03/2004 - 00/

Líneas de Investigación , Facultad de Química , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

NEURONACH.Bioinformática Estructural aplicada al estudio de interacción receptor-ligando para diferentes subtipos de receptores nicotínicos de acetil colina , Coordinador o Responsable

03/2003 - 00/

Líneas de Investigación , Facultad de Química - UdelaR , DETEMA / LabioFarMol  
PROVITIS. Estudios experimentales e in silico de las propiedades antioxidantes de fenoles contenidos en productos naturales ,  
Coordinador o Responsable

11/1993 - 00/

Líneas de Investigación , Facultad de Química - UdelaR , DETEMA/LaBioFarMol  
CHAGASMEDCHEM-Diiseño de Candidatos a ser desarrollados como Antichagásicos. , Coordinador o Responsable

07/2007 - 12/2007

Docencia , Grado  
Bioinformática Estructural , Química Farmacéutica

03/2004 - 08/2007

Docencia , Grado  
Introducción a la Bioinformática , Química Farmacéutica

03/1976 - 03/1990

Docencia , Grado  
Mecánica Cuántica , Química Farmacéutica

03/1978 - 03/1989

Docencia , Grado  
Química Cuántica , Química Farmacéutica

03/1986 - 08/1986

Docencia , Grado  
Simetría Molecular y Teoría de Grupos , Química Farmacéutica

03/1978 - 08/1978

Docencia , Grado  
Espectroscopia Molecular , Química Farmacéutica

09/2013 - 12/2013

Docencia , Maestría  
Bioinformática Estructural - Bioinformática II , Responsable , Maestría en Bioinformática

09/2011 - 12/2011

Docencia , Maestría  
Bioinformática II , Organizador/Coordinador , Maestría en Bioinformática

9/2010 - 9/2010

Docencia , Maestría  
NAMD-FEP , Organizador/Coordinador , Maestría en Bioinformática - PEDECIBA

6/2010 - 6/2010

Docencia , Maestría  
NAMD , Organizador/Coordinador , Maestría en Bioinformática - PEDECIBA

09/2010 - 12/2010

Docencia , Maestría  
Diseño de Compuestos Bioactivos , Responsable , Maestría en Bioinformática

04/2013 - 04/2013

Docencia , Especialización  
Extracción, separación e identificación de carotenoides: carotenoides en alimentación, nutrición y salud , Organizador/Coordinador ,  
Educación Permanente

3/2011 - 6/2011

Docencia , Especialización  
Diseño de Compuestos Bioactivos , Organizador/Coordinador , Maestría en Bioinformática

6/2005 - 6/2005

Docencia , Especialización

"Minicurso Apiterapia" impartido durante el 1er Congreso de Apicultura del Mercosur. Punta del Este. 24-26 Junio 2005. , Invitado

2/2004 - 2/2004

Docencia , Especialización

2.2.3.1 "Farmacología y Modelado biomolecular aplicado al diseño de drogas para la enfermedad de Chagas". Febrero 2004. Centro de Capacitación y Perfeccionamiento Docente "Prof. Juan E. Pivel Devoto, Montevideo, Uruguay. , Invitado

12/2003 - 12/2003

Docencia , Especialización

"Investigación y desarrollo de fármacos antiprotozoarios: Estado Actual y nuevas Estrategias". Curso Regional Investigación y Desarrollo de Fármacos Antiprotozoarios: estado actual y nuevas estrategias". Diciembre- 2003 AMSUD-Pasteur. Montevideo , Invitado

03/1988 - 12/1990

Docencia , Especialización

Farmacología Cuántica , Química Farmacéutica

03/1988 - 08/1988

Docencia , Especialización

Investigación en el diseño de compuestos antichagásicos: Síntesis, estructura, bioquímica y teoría , Química Farmacéutica

12/1987 - 12/1987

Docencia , Especialización

"Diseño de Agentes Antichagásicos". Facultad de Química. 12-19 Diciembre 1987 , Organizador/Coordinador

3/2014 - Actual

Docencia , Doctorado

Diseño de Compuestos Bioactivos , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

03/2014 - Actual

Docencia , Doctorado

Taller de Simulaciones Biomoleculares , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

7/2013 - 7/2013

Docencia , Doctorado

Organizador/Coordinador , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

6/2013 - 6/2013

Docencia , Doctorado

Solving complex biological problems using free-energy calculations , Organizador/Coordinador , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

03/2013 - 06/2013

Docencia , Doctorado

Taller de Simulaciones Biomoleculares , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

03/2013 - 06/2013

Docencia , Doctorado

Diseño de Compuestos Bioactivos , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

5/2012 - 7/2012

Docencia , Doctorado

Diseño de Compuestos Bioactivos , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

3/2012 - 5/2012

Docencia , Doctorado

Taller de Simulaciones Biomoleculares , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

9/2012 - 12/2012

Docencia , Doctorado

Bioinformática Estructural - Bioinformática II , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

3/2010 - 6/2010

Docencia , Doctorado

Diseño de Compuestos Bioactivos , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

03/1998 - 08/2006

Docencia , Doctorado

Modelado Biomolecular , Doctorado en Química

9/1997 - 9/1997

Docencia , Doctorado

QUI.300-5.97 – Topics en Fisico-Química: Química Computacional aplicada al Modelagem Molecular (Módulo 2)". Universidad Federal de Sao Carlos. Septiembre 1997. , Invitado

5/1997 - 5/1997

Docencia , Doctorado

"Química Computacional Aplicada a Modelagem Molecular: uma introducao". Universidad Federal de Sao Carlos. Mayo 1997 , Responsable

11/1997 - 11/1997

Docencia , Doctorado

Mecánica, Dinámica y Farmacología Molecular, Reactividad Enzimática en Sitios Ativos". Noviembre 1997. Universidad Federal de Sao Carlos. , Invitado

10/1997 - 10/1997

Docencia , Doctorado

'Modelado Molecular". Universidad de Chile Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas. Octubre 1997 , Invitado

03/1991 - 08/1997

Docencia , Doctorado

Modelado Molecular , Doctorado en Química

8/1996 - 8/1996

Docencia , Doctorado

2.2.2.2.6 "Modelado Molecular". Universidad de Chile. Facultad de Ciencias. Agosto 1996 , Invitado

09/1996 - 09/1996

Docencia , Doctorado

2.2.2.2.5 "Introducción al Modelado Molecular". Universidad de Chile. Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas. Septiembre 1996 , Invitado

9/1998 - 9/1998

Docencia , Técnico nivel superior

"Estructura Biomacromolecular". Noviembre 1998. Dictado en el Ciclo de los Sábados para la Enseñanza de la Química y sus Aplicaciones. , Invitado

10/1989 - 10/1989

Docencia , Técnico nivel superior

"Diseño de fármacos asistido por computadoras". Octubre 1989. Curso Internacional de Química. Nivel Superior. En el marco del Centenario de la Asociación de Química y Farmacia del Uruguay. , Invitado

03/2014 - Actual

Extensión , Facultad de Química - UdeLaR , DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural

Envejeciendo sanamente.Campaña de sensibilización nutricional en el adulto mayor, fomentando el consumo de alimentos ricos en carotenoides que aportan beneficios en la salud.

03/2011 - 03/2012

Extensión , Facultad de Química , Centro de Bioinformática Estructural

Tutor del Proyecto de Extensión estudiantil PEB (Proyecto de Extensión en Bioinformática) realizado con el Liceo IPOLL de Salto

07/2011 - 12/2011

Extensión , Facultad de Química - PEDECIBA , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

Construir, mirar y transformar moléculas jugando. Proyecto de Extensión realizado en conjunto con la Estuela Numero 35 Guatemala de Montevideo

6/2013 - Actual

Gestión Académica , PEDECIBA , QUÍMICA

Coordinadora de la subárea Fisicoquímica

06/2011 - Actual

Gestión Académica , PEDECIBA , Maestría en Bioinformática  
Coordinadora de la Maestría en Bioinformática

02/2011 - Actual

Gestión Académica , Facultad de Química - PEDECIBA , PEDECIBA Química  
Titular por los investigadores de la Comisión Coordinadora del Área

03/2010 - Actual

Gestión Académica , Facultad de Química , Comisión de Dedicación Total  
Titular por el orden Docente

03/2010 - Actual

Gestión Académica , PEDECIBA , Maestría en Bioinformática  
Integrante Titular de la Comisión de Maestría

03/2010 - Actual

Gestión Académica , Facultad de Química , DETEMA  
Representante titular por los G 3,4 y 5 del departamento

03/2010 - Actual

Gestión Académica , Facultad de Química , Claustro de la Facultad de Química  
Titular por el orden Docente

06/2013 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - Udelar , DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural  
PROVITIS.NANO-Desarrollo y caracterización de un producto antiinflamatorio en base a liposomas de orujo de uvas , Coordinador o Responsable

03/2013 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - Udelar , DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural  
CHAGASMEDCHIM.QUINO- Paranaftoquinonas contra el Mal de Chagas , Coordinador o Responsable

03/2004 - 06/2011

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - Udelar , DETEMA/LaBioFarMol  
NEURONACH.CYT-Exploración de nuevos agonistas nicotínicos con selectividad por subtipo y modelización computacional de la interacción ligando-receptor , Integrante del Equipo

10/2008 - 10/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - Udelar , DETEMA/LaBioFarMol  
PROVITIS.DGIP-Investigación, desarrollo e innovación en base a propóleos y uvas: diseño de un concentrado polifenólico con propiedades protectoras contra el stress oxidativo. , Coordinador o Responsable

03/2008 - 06/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - Udelar , DETEMA/LaBioFarMol  
Investigación, desarrollo e innovación en base a vino tinto: diseño de un concentrado polifenólico con propiedades protectoras contra el stress oxidativo. , Coordinador o Responsable

01/2006 - 01/2007

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - Udelar , DETEMA/LaBioFarMol  
NEURODIABET.Modelización biomolecular: estudio de hormonas neuroendocrinas de interés en el área de salud, potenciales usos en el tratamiento de la obesidad y enfermedades neurodegenerativas , Integrante del Equipo

01/2005 - 01/2007

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - Udelar , DETEMA/LaBioFarMol  
PROPOLIS.CSIC-Flavonoides con propiedades antioxidantes extraídos de propóleos y marcela , Coordinador o Responsable

01/2001 - 01/2007

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - Udelar , DETEMA/LaBioFarMol  
CHAGASPACE:Structure based Drug Design and Evaluation of Trypanocidal natural compounds against Chagas Disease. , Coordinador o Responsable

01/1999 - 01/2001

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - Udelar , DETEMA/LaBioFarMol  
CHAGASMEDCHIM.SARECNET-Network for Research and Training in Parasitic Diseases at the Southern cone of Latin America. , Coordinador o Responsable



04/1994 - 04/1996

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - Udelar , DETEMA/LaBioFarMol

CHAGASMEDCHIM.CONICYT- Diseño de medicamentos antichagásicos selectivos , Coordinador o Responsable

06/1993 - 06/1995

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - Udelar , DETEMA/LaBioFarMol

CHAGASMEDCHIM.CSIC-Modelado Gráfico y Estudio de las Propiedades Dinámicas de Complejos Biomacromoleculares Relacionados con Enfermedades Parasitarias. , Coordinador o Responsable

01/1991 - 01/1995

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - Udelar , DETEMA/LaBioFarMol

CHAGASMEDCHIM.SAREC-Theoretical and Experimental Pharmacological Approach to Chagas Disease Specific Action of New Drugs Against Flavoenzyme of the Parasitic Related Organism and the Mammalian Host. , Coordinador o Responsable

08/1991 - 12/1993

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , DETEMA / LabioFarMol

CHAGASMEDCHIM.START-Diseño de nuevas drogas antichagásicas modelando su actividad frente a oxidoreductasas del metabolismo mamífero o parasitario , Coordinador o Responsable

03/2014 - 00/

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - Udelar , DETEMA - Centro de Bioinformática Estructural

TARGETFISH.PHENOLS , Coordinador o Responsable

11/2011 - 00/

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - PEDECIBA , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

NEURONACH.HPC-GPC-MD , Coordinador o Responsable

03/2010 - 00/

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química - PEDECIBA , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

NEURONACH.LBDD: diseño de nuevos compuestos a ser desarrollados como antiparkinsonianos basados en agonistas de receptores nicotínicos de acetil colina , Coordinador o Responsable

03/2010 - 00/

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

CreA: Estudios de interacciones ADN-proteína aplicados a proteínas de Aspergillus nidulans , Coordinador o Responsable

03/2009 - 00/

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Centro de Bioinformática Estructural - DETEMA

FABPLOCK: estudio de proteínas transportadoras de ácidos grasos en cestodes , Coordinador o Responsable

03/2008 - 00/

Proyectos de Investigación y Desarrollo , CeBioinfo - DETEMA - Facultad de Química - Udelar , PEDECIBA - Udelar

Maestría en Bioinformática , Coordinador o Responsable

## **Univ Catolica Del Norte , Univ Catolica Del Norte , Chile**

### [Vínculos con la institución](#)

03/2008 - 03/2010, *Vínculo:* Académico, (44 horas semanales / Dedicación total)

### [Actividades](#)

03/2008 - 02/2010

Líneas de Investigación , Facultad de Ciencias , Departamento de Química y Farmacia

PROVITIS. Estudio de las propiedades antioxidantes de productos naturales autóctonos de Chile y Uruguay , Coordinador o Responsable

03/2008 - 02/2010

Líneas de Investigación , Facultad de Ciencias , Departamento de Física

NEURO.UCN-Bioinformática Estructural aplicada a enfermedades neurodegenerativas , Coordinador o Responsable

03/2008 - 03/2010

Docencia , Grado

Farmacología II

03/2008 - 03/2010

Docencia , Grado

Química Farmacéutica III

03/2008 - 03/2010

Docencia , Grado

Bioinformática Estructural

03/2008 - 03/2010

Docencia , Grado

Farmacología I

03/2008 - 03/2010

Docencia , Grado

Farmacología III

03/2008 - 03/2010

Otra actividad técnico-científica relevante , Universidad Católica del Norte - CHILE , Facultad de Ciencias

Especialista convocada para consolidar enseñanza, investigación y extensión en Química Farmacéutica, bajo un proyecto financiado por un programa del MECESUP(Programa de Mejoramiento de la Calidad y Equidad de la Educación Superior) - CHILE

03/2008 - 03/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Departamento de Química y Farmacia

PROVITIS-MEL , Coordinador o Responsable

03/2008 - 03/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Departamentos de Química y Física

CQTEQUINAS.UCN-Catequinas de plantas autóctonas uruguayas y chilenas , Integrante del Equipo

03/2008 - 03/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Departamento de Química y Farmacia y Física

VITIS.UCN-MEL-Desarrollo de antioxidantes a partir de vinos chilenos , Coordinador o Responsable

03/2008 - 03/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Departamentos de Química, Química y Farmacia y Física

PROVITIS.DGIP-Investigación, desarrollo e innovación en base a propóleos y vino tinto: diseño de un concentrado polifenólico con propiedades protectoras contra el stress oxidativo , Coordinador o Responsable

## Lineas de investigación

*Título:* ABRESIST.Bioinformática estructural aplicada al estudio del mecanismo de resistencia de antibióticos quinolónicos

*Tipo de participación:* Coordinador o Responsable

*Objetivo:* Estudio de las bases moleculares de la resistencia de antibióticos quinolónicos, mediante el diseño de proteínas transmembranales de *Neisseria gonorrhoeae* y la dilucidación de factores determinantes de la unión y reflujo hacia el exterior de las bacterias, de dichas moléculas.

*Equipos:* Ana Acevedo(Integrante); Graciela Borthagaray(Integrante)

*Palabras clave:* bioinformática estructural; resistencia a antibióticos quinolónicos

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

*Título:* CHAGASMEDCHEM-Diseño de Candidatos a ser desarrollados como Antichagásicos.

*Tipo de participación:* Coordinador o Responsable

*Objetivo:* CHAGASMEDCHEM.Diseño de moléculas candidatas a ser empleadas como quimioterápicos de la Enfermedad de Chagas, en base al estudio de mecanismos enzimáticos de defensa contra el stress oxidativo de parásitos y huéspedes. Desarrollo de formas farmacéuticas (nanoestructuras) conteniendo extractos de productos naturales con actividades antitripanosoma. Estudios de la expresión en *T. cruzi* de ciclofilina y su relación con inhibidores análogos de ciclosporina. Modelado tridimensional y validación de la estructura de: proteína nucleosomal del cromosoma de *Trypanosoma cruzi*, transalidasa y dehidrogenasa de alfa-aminoácidos hidroxilados aromáticos (AHADH)

*Equipos:* Marta Dubin(Integrante); Elena Alvareda(Integrante); Sara Aguilera(Integrante); Federico Iribarne(Integrante); Pablo Denis(Integrante); Roberto Carraro(Integrante); Jackeline Búa(Integrante); Orlando Tapia(Integrante); Hugo Cerecetto(Integrante); Helena Pardo(Integrante); Ricardo Tapia(Integrante); Karina Vazquez(Integrante); Mercedes Gonzáles(Integrante); Cristian Salas(Integrante)

*Palabras clave:* Chagas, nuevos fármacos; bioinformática estructural

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

**Título:** CREA.Estudio de la interacción con ADN de factores transcripcionales de *Aspergillus Nidulans*

**Tipo de participación:** Coordinador o Responsable

**Objetivo:** Estrategias in silico para el modelado biomolecular del factor transcripcional CreA y su unión a ADN. A partir del modelo tridimensional de CreA y un conjunto de mutantes, unidos a ADN, se realizan simulaciones de dinámica molecular en fase acuosa. El análisis del comportamiento simulado de los complejos en solución permite inferir patrones de contacto proteína-ADN y medir energías de interacción. Tales medidas se pueden correlacionar con medidas experimentales de unión proteína-ligando realizadas por investigadores que pertenecen a nuestro equipo de trabajo

**Equipos:** Patricia Esperón(Integrante); Claudio Scazzocchio(Integrante)

**Palabras clave:** CreA; ADN

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

**Título:** FABLOCK. Estudios in silico de proteínas transportadoras de ácidos grasos de *Echinococcus granulosus*

**Tipo de participación:** Coordinador o Responsable

**Objetivo:** Las estrategias de simulación in silico: modelado biomolecular, anclaje, dinámica molecular son aplicadas para dilucidar la estructura tridimensional y comportamiento en solución de proteínas transportadoras de ácidos grasos descubiertas a partir del genoma del *Echinococcus granulosus*. A partir de estas investigaciones, se puede predecir la estructura tridimensional de proteínas hasta ahora desconocida, proponer sus modos y especificidad de unión a ligandos ácidos grasos y estudiar otras posibles funcionalidades como el disparo de señales de localización nuclear.

**Equipos:** Adriana Estéves(Integrante)

**Palabras clave:** FABPs

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

**Título:** NEURO.UCN-Bioinformática Estructural aplicada a enfermedades neurodegenerativas

**Tipo de participación:** Coordinador o Responsable

**Objetivo:** Estudios in silico de receptores asociados a enfermedades neurodegenerativas

**Equipos:** Andres Abin(Integrante); Bruce Cassels(Integrante); Federico Dajas(Integrante); Floria Panzetti(Integrante)

**Palabras clave:** receptores nicotínicos; citisinoides; parkinson; problemas cognitivos; alzheimer

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

**Título:** NEURONACH.Bioinformática Estructural aplicada al estudio de interacción receptor-ligando para diferentes subtipos de receptores nicotínicos de acetil colina

**Tipo de participación:** Coordinador o Responsable

**Objetivo:** Existe un creciente interés en el desarrollo de agonistas para nAChRs neuronales debido a su potencial terapéutico como analgésicos y para el tratamiento de diferentes desordenes neurológicos y psiquiátricos relacionados con la alteración de la función colinérgica. Sin embargo, su potencial terapéutico, generalmente vinculado a la estimulación de los subtipos A4B2 y A7, como por ejemplo el diseño de nuevos fármacos antiparkinsonianos, está acompañado de una variedad de efectos secundarios no deseados, asociados fundamentalmente a la estimulación de los nAChRs ganglionares (principalmente A3B4). En este sentido el desarrollo de herramientas farmacológicas capaces de discriminar los diferentes subtipos de nAChRs abre la posibilidad de desarrollar nuevos agentes terapéuticos que eviten o disminuyan los efectos no deseados. La reciente publicación en el Protein Data Bank del modelo cristalográfico del complejo nicotina - proteína de unión de acetilcolina de caracol, abre la posibilidad de generar modelos computacionales de los diferentes subtipos de nAChRs neuronales y con éstos, calcular las energías de unión de diferentes estructuras moleculares. Por otra parte, existe una gran cantidad de datos experimentales que permiten construir bases de datos de constantes de afinidad tanto para A7 como para A4B2 de distintos derivados de los agonistas prototípicos ((-)-Nicotina, (-)-Citisina, (-)-Anatoxina-A y (-)-Epibatidina). En este contexto, el proyecto se enfoca hacia la modelización de la interacción receptor-ligando para diferentes subtipos de nAChRs, de manera tal que nos permita predecir la afinidad y especificidad de los diferentes ligandos y así, a través de un tamizaje virtual, proponer nuevos compuestos candidatos capaces de discriminar entre los diferentes nAChRs en estudio.

**Equipos:** Federico Dajas(Integrante); Federico Iribarne(Integrante); Gustavo Silva(Integrante); Juan Andrés Abin(Integrante); Bruce K. Cassels(Integrante); Susan Wonnacott(Integrante); Yamandú González(Integrante); Pablo Ezzati(Integrante); Christophe Chipot(Integrante); Francois Dehez(Integrante); Timothy Galagher(Integrante)

**Palabras clave:** nAChR; enfermedades neurodegenerativas; nicotina; citisina; anatoxina; fármaco, QSAR, docking, MD, FEP

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

**Título:** NUTRICAROT

**Tipo de participación:** Coordinador o Responsable

**Objetivo:** CAROT. Estrategias in silico, in vitro y empresariales aplicada a la modelización, análisis conformacional, isomería estructural de carotenoides y su implicancia en las interacciones y propiedades "in vivo" y al desarrollo de un nutraceutico en base a carotenoides

**Equipos:** Adriana Gambaro(Integrante); Antonio Melendez(Integrante); Mauricio Vega(Integrante); Robert Rodriguez(Integrante); Carolina Lopez(Integrante); Maria Jesus Rodrigo(Integrante); Valentina Velazquez(Integrante); Carla Stinco(Integrante)



*Alumnos:*

*Equipo:* Patricia Esperón(Integrante); Claudio Scazzocchio(Integrante)

*Financiadores:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Otra

*Palabras clave:* ADN interacciones; factores transcripcionales; Aspergillus nidulans

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biología molecular

2009 - Actual

*Título:* FABPLOCK: estudio de proteínas transportadoras de ácidos grasos en cestodes, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* El Proyecto, incluido en la línea de investigación del mismo nombre, tiene como objetivo general la profundización en el conocimiento de la función de las FABPs de Echinococcus granulosus e identificación de blancos potenciales para diagnosis, desarrollo de drogas y vacunas. Como objetivos específicos: Rastreo de antagonistas de las EgFABPs mediante técnicas in silico, in vitro y posterior comprobación in vivo.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:*

*Equipo:* Adriana Estéves(Integrante)

*Financiadores:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Otra

*Palabras clave:* cestodes FABPs; Echinococcus granulosus; dinámica molecular; docking; ácidos grasos

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biología molecular

2008 - Actual

*Título:* Maestría en Bioinformática, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* La Maestría en Bioinformática tiene como objetivos: Formación de RRHH de nivel de posgrado en Bioinformática y promoción de la interacción entre investigadores de las distintas vertientes que componen la Bioinformática. -Sustentar la formación de profesionales bioinformáticos de alto nivel tendiente a la formación de una plataforma de alto nivel en esta área de conocimiento. -Promoción de la interacción entre los centros académicos formadores de RRHH y los sectores empresariales (ej. industria Biotecnológica) generadores de demanda con vista a la futura inserción laboral.

*Tipo:* Otra

*Alumnos:* 42(Maestría/Magister),

*Equipo:* Federico Iribarne(Integrante); Mauricio Vega(Integrante); Alvaro Momburu(Responsable); Margot Paulino(Responsable); Mariela Torre(Integrante); F Alvarez Valin(Integrante); Pablo Ezzatti(Integrante); Dina Wonsever(Integrante); Hugo Naya(Integrante); Jose Tort(Integrante); Enrique Lessa(Integrante); Jose Sotelo(Integrante); Beatriz Garat(Integrante); Marco Scavino(Integrante); Pablo Garcia(Integrante); Alfonso Vicente(Integrante); Gustavo Guerberoff(Integrante); Ivana Nuñez(Integrante); Paula Bermolen(Integrante); Pablo Smircich(Integrante); Mercedes Gonzalez(Integrante); Leonardo Moreno(Integrante)

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

Comisión Académica de Posgrado / Apoyo financiero

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

*Palabras clave:* Bioinformática; Maestría

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

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

2011 - Actual

*Título:* NEURONACH.HPC-GPC-MD, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* El Proyecto, diseñado en el marco de la línea de investigación NEURONACH, consiste en desarrollar estrategias de High Performance Computing utilizando arquitecturas que incluyan Graphics Unity Processors (GPUs) para llevar a cabo dinámicas moleculares de largo alcance de sistemas complejos incluyendo proteínas membranas y solvente. La aplicación de tal estrategia será realizada a modelos de receptores nicotínicos de acetil colina humanos.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 1(Maestría/Magister),

*Equipo:* Yamandú González(Integrante); Pablo Ezzati(Integrante)

*Financiadores:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Otra

*Palabras clave:* HPC GPUs; nAChR; dinámica molecular

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / High Performance Computing

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

2010 - Actual

*Título:* NEURONACH.LBDD: diseño de nuevos compuestos a ser desarrollados como antiparkinsonianos basados en agonistas de receptores nicotínicos de acetil colina, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* El proyecto se basa en investigaciones desarrolladas previamente por nuestro grupo de investigación, en el marco de la línea de investigación NEURONACH. La propuesta se basa en el antecedente de que los receptores neuronales nicotínicos de acetilcolina son blancos terapéuticos promisorios para el desarrollo de nuevas herramientas farmacológicas para el tratamiento de diversos desórdenes neurológicos. Los receptores del subtipo  $\alpha 4\beta 2$  son los más relevantes debido su abundancia y distribución, así como por las funciones fisiológicas que ellos modulan. Si bien se posee información sobre las características que hacen potente a un agonista nicotínico, no hay demasiadas evidencias a nivel estructural que puedan justificar tal comportamiento. Las estrategias de filtrado virtual a partir de bases de la base de datos Pubchem, dilucidación de farmacóforo y análisis cuantitativo estructura-actividad (QSAR), combinadas, permiten analizar en forma gráfica y estadística el tipo de propiedades asociadas a la estructura (descriptores) que puedan estar vinculados a la actividad.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 1(Pregrado), 1(Maestría/Magister),

*Equipo:* Andres Abin(Integrante); Gustavo Silva(Integrante); Andrés Milano(Integrante)

*Financiadores:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Otra

*Palabras clave:* antiparkinsonianos; Ligand Based drug design

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

2013 - Actual

*Título:* PROVITIS.NANO-Desarrollo y caracterización de un producto antiinflamatorio en base a liposomas de orujo de uvas, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable,

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 1(Pregrado),

*Equipo:* Pablo Miranda(Integrante); Helena Pardo(Integrante)

*Financiadores:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca  
Universidad de la República / Remuneración

*Palabras clave:* liposomas; antiinflamatorios

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

2014 - Actual

*Título:* TARGETFISH.PHENOLS, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable,

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 1(Maestría/Magister),

*Financiadores:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca  
Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Beca

*Palabras clave:* fenoles; quercetina

1991 - 1993

*Título:* CHAGASMEDCHIM.START-Diseño de nuevas drogas antichagásicas modelando su actividad frente a oxidoreductasas del metabolismo mamífero o parasitario, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Esta propuesta fue la primera de un conjunto de proyectos que conforman hasta la actualidad la línea de investigación CHAGASMEDCHIM, dedicada a modelado y estudio por métodos in silico, de series de estructuras moleculares que pudieran luego de su selección a través de nuestra investigación, ser sugeridas como candidatos para el desarrollo de drogas antichagásicas. Las enzimas clave utilizadas para tal fin fueron oxidoreductasas del metabolismo mamífero o parasitario, y especialmente tripanotona y glutatión reductasa.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 2(Pregrado), 2(Especialización), 2(Maestría/Magister prof.),

*Equipo:* Orlando Tapia(Integrante); Andrés Oscar Manuel Stoppani(Integrante); Noriko Hikichi(Integrante); María Hansz(Integrante)

*Financiadores:* Otra institución nacional / Universidad de la República / Apoyo financiero

*Palabras clave:* Antichagásicos

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

1993 - 1995

*Título:* CHAGASMEDCHIM.CSIC-Modelado Gráfico y Estudio de las Propiedades Dinámicas de Complejos Biomacromoleculares Relacionados con Enfermedades Parasitarias. , *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Este proyecto forma parte de una serie de propuestas englobadas en un objetivo único que es el estudio in silico de biomoléculas asociadas a enfermedades parasitarias. En este caso, se desarrollaron las metodologías y protocolos para el modelado Gráfico y estudio mediante Dinámica Molecular de Complejos Biomacromoleculares Relacionados con Enfermedades Parasitarias. Ejemplo de ello: modelado y estudio de interacciones entre enzimas claves como tripanotona reductasa y glutatión reductasa, y sus sustratos naturales (tripanotona y glutatión).

*Tipo:* Desarrollo

*Alumnos:* 2(Pregrado), 2(Especialización), 1(Doctorado)

*Equipo:* Orlando Tapia(Integrante); Andrés Oscar Manuel Stoppani(Integrante); Noriko Hikichi(Integrante); María Hansz(Integrante)

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

*Palabras clave:* Antichagásicos

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

1991 - 1995

*Título:* CHAGASMEDCHIM.SAREC-Theoretical and Experimental Pharmacological Approach to Chagas Disease Specific Action of New Drugs Against Flavoenzyme of the Parasitic Related Organism and the Mammalian Host. , *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Este fue el primero de nuestros emprendimientos dedicados al desarrollo de nuevas drogas antichagásicas. Se organizaron bases de datos, conteniendo estructuras moleculares con información de actividades antitripanosoma (como nitrofuranos), se calcularon y midieron sus propiedades fisicoquímicas y se realizaron estudios de la correlación estructura-actividad (QSAR). También, se implementaron las metodologías para el estudio gráfico y simulación de enzimas claves implicadas en los mecanismos tripanocidas, en este caso, en los mecanismos de stress oxidativo parásito y mamífero, como lo son la tripanotona reductasa y la glutatión reductasa, respectivamente. Finalmente, se implementaron los estudios dirigidos a conocer la forma de unión de las drogas ya estudiadas por QSAR y las enzimas claves antes mencionadas, generándose complejos biomacromoleculares que se sometieron a estudios de anclaje (docking) y dinámica molecular.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 3(Pregrado), 2(Especialización), 1(Maestría/Magister prof.), 1(Doctorado)

*Equipo:* Orlando Tapia(Integrante); Andrés Oscar Manuel Stoppani(Integrante); Noriko Hikichi(Integrante); María Hansz(Integrante)

*Financiadores:* Institución del exterior / SAREC / Apoyo financiero

*Palabras clave:* Antichagásicos

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

1994 - 1996

*Título:* CHAGASMEDCHIM.CONICYT- Diseño de medicamentos antichagásicos selectivos, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Estudios de la relación estructura actividad de compuestos nitrofuránicos en las enzimas clave tripanotona y glutatión reductasa, utilizando herramientas de bioinformática estructural

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 2(Pregrado), 2(Especialización), 1(Maestría/Magister prof.),

*Equipo:* Federico Iribarne(Integrante); Orlando Tapia(Integrante); Andrés Oscar Manuel Stoppani(Integrante); Noriko Hikichi(Integrante); María Hansz(Integrante)

*Financiadores:* DINACYT/DICYT/CONICYT / Apoyo financiero

*Palabras clave:* Antichagásicos

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

1999 - 2001

*Título:* CHAGASMEDCHIM.SARECNET-Network for Research and Training in Parasitic Diseases at the Southern cone of Latin America. , *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Este emprendimiento fue desarrollado en base a la cantidad de recursos humanos especializados en el estudio de enfermedades parasitarias que se generaron durante la ejecución del proyecto anteriormente financiado por SAREC. En este caso, se consolidó una Red Temática para la formación de nuevos recursos humanos que pudieran seguir colaborando en el área de las enfermedades parasitarias en el cono Sur de Latino América.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:*

*Financiadores:* Institución del exterior / SAREC / Cooperación

*Palabras clave:* parasitos

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

2001 - 2007

*Título:* CHAGASPACE: Structure based Drug Design and Evaluation of Trypanocidal natural compounds against Chagas Disease. , *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Este proyecto, ag inscripto dentro de la línea de investigación CHAGASMEDCHIM, agrupó nuevas instituciones de diferentes países, a saber: Universidad Nacional de Costa Rica, Universidad EARTH (Costa Rica), Universidad de Birmingham, Alabama (USA), NASA (USA), Universidad de Santiago de Chile (UsaCh), Universidad Católica del Norte (UCN), Chile, Instituto Mario Fátala Chabén (Buenos Aires, Argentina) y la Universidad de la República (UdelaR). Se realizó un convenio multinacional a través del cual se desarrollaron investigaciones de búsqueda de nuevos compuestos activos contra la enfermedad de Chagas. Se realizaron 'screenings' en las selva húmeda de Costa Rica y en el desierto de Atacama en Chile. Dichos extractos se analizaron en relación a su capacidad inhibitoria del crecimiento del parásito causante de la enfermedad de Chagas (T. cruzi), y de una enzima clave del stress oxidativo del tripanosoma, la tripanotiona reductasa (TR). También, se realizaron estudios in silico de moléculas con actividad inhibitoria en TR y su contraparte mamífera, la glutatión reductasa (GR). Se realizaron reuniones anuales en las cuales los resultados fueron discutidos y los planes rediseñados.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 3(Pregrado), 2(Maestria/Magister prof.), 2(Doctorado)

*Equipo:* Elena Alvareda(Integrante); Sara Aguilera(Integrante); Federico Iribarne(Integrante); Roberto Carraro(Integrante); Orlando Tapia(Integrante); Ana García(Integrante); Larry De Lucas(Integrante); Bert Kohlman(Integrante); Silvia Sepúlveda(Integrante)

*Financiadores:* Institución del exterior / Nacional Aeronautics and Space Administration / Apoyo financiero

*Palabras clave:* Antichagásicos; Biodiversidad; tripanotiona reductasa

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

## Sistema Nacional de Investigadores

2006 - 2007

*Título:* NEURODIABET. Modelización biomolecular: estudio de hormonas neuroendocrinas de interés en el área de salud, potenciales usos en el tratamiento de la obesidad y enfermedades neurodegenerativas , *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Este proyecto consistió en simular mediante dinámica molecular en medio acuoso con una concentración de iones equivalentes a la del pH fisiológico, la estructura pequeñas hormonas neuroendocrinas, que son péptidos entre 30 y 40 , implicadas en la acción glucoreguladora, siendo por ello potenciales agentes terapéuticos en el control de diabetes y obesidad.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 1(Especialización),

*Equipo:* Cristina Donnamaría(Responsable)

*Financiadores:* Institución del exterior / Comision de Investigaciones Científicas / Apoyo financiero

*Palabras clave:* diabetes; obesidad; hormona neuroendocrina

2005 - 2007

*Título:* PROPOLIS.CSIC-Flavonoides con propiedades antioxidantes extraídos de propóleos y marcela, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* La propuesta, incluida dentro de la línea de investigación PROVITIS, fue realizada en asociación con el Sector Productivo uruguayo (empresa TEPYVE, Sociedad Apícola Uruguaya, Fundación Zonamérica) consistió en la extracción de fenoles de propóleos y marcela y estudio de sus estructuras y propiedades antioxidantes.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 3(Pregrado), 1(Maestría/Magister),

*Equipo:* Marta Dubin(Integrante); Elena Alvareda(Integrante); Sara Aguilera(Integrante); Manuel Cedrés(Integrante); Loreto Calderón(Integrante); Christian Rojas(Integrante)

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

*Palabras clave:* antioxidantes; propóleos

## Sistema Nacional de Investigadores

2008 - 2010

*Título:* CQTEQUINAS.UCN-Catequinas de plantas autóctonas uruguayas y chilenas, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Extracción de catequinas a partir de plantas autóctonas uruguayas y chilenas. Desarrollo de procesos extractivos y analíticos de contenido y capacidad antioxidantes. estudio del efecto de los extractos a nivel del metabolismo endógeno y sometido a situaciones patológicas

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 1(Pregrado),

*Equipo:* Victor Kesternich(Responsable); Manuel Navero(Integrante)

*Financiadores:* Institución del exterior / Facultad de Ciencias / Otra

*Palabras clave:* catequinas; plantas autóctonas

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales



2008 - 2010

*Título:* Investigación, desarrollo e innovación en base a vino tinto: diseño de un concentrado polifenólico con propiedades protectoras contra el stress oxidativo., *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* PROVITIS.MEL-Esta propuesta de investigación, desarrollo e innovación, está inserta en el área de la Fitoquímica y su objetivo principal es la obtención de un extracto patronizado a partir de vino tinto, con propiedades antioxidantes analizadas y certificadas.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 3(Pregrado),

*Equipo:* Patricia Pozo(Integrante); Sara Aguilera Morales(Integrante); Pablo Carmona(Integrante); Yisel Rodriguez(Integrante); Kathy Avalos(Integrante); Alejandra Rodríguez(Integrante); Manuel Navero(Integrante)

*Financiadores:* Institución del exterior / Minera Escondida Limitada BHP Billington / Apoyo financiero

*Palabras clave:* antioxidantes

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / antioxidantes en productos naturales

2008 - 2010

*Título:* PROVITIS-MEL, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* El proyecto tuvo como objetivo el desarrollo de extractos de productos naturales con alto valor agregado. Como actividades específicas tuvo: extracción de fenoles a partir de propóleos Uruguayos ,vino, orujos y borras de uvas Chilenas. Desarrollo de procesos extractivos, y analíticos del contenido y capacidad antioxidante por diferentes metodologías (Folin Ciocalteu, HPLC, HPLS-MSíndice de oxidación, DPPH, ABTS+) y enzimológicas (inhibición de enzimas claves de enfermedades : xantin oxidasa, COXII, COXI, LOX y FOS2). Estudios LBDD y SBDD de las estructuras y actividades.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 4(Pregrado),

*Equipo:* Carola Acuña(Integrante); Sara Aguilera Morales(Integrante); Yisel Rodriguez(Integrante); Victoria Espinosa(Integrante); Miguel Reyes(Integrante); Manuel Navero(Integrante); Katherine Avalos(Integrante); Hrovj Hrzich(Integrante)

*Financiadores:* Institución del exterior / Minera Escondida Ltda / Apoyo financiero

*Palabras clave:* propoleos uruguayos; uvas chilenas

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

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

2008 - 2010

*Título:* PROVITIS.DGIP-Investigación, desarrollo e innovación en base a propóleos y uvas: diseño de un concentrado polifenólico con propiedades protectoras contra el stress oxidativo., *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* El objetivo principal de este proyecto es el estudio y obtención a escala piloto, de un concentrado patronizado de polifenoles a partir de propóleos y uvas, cuyo contenido fenólico y capacidad antioxidante estarán documentados y certificados. Se están realizando los análisis de polifenoles totales en muestras vino tinto y propóleos, de capacidad antioxidante mediante técnicas de DPPH y ABTS+, obtención de un concentrado de vino tinto patronizado (contenido fijo de polifenoles totales), de un extracto hidro etanólico de propóleos por método de extracción a reflujo (Soxhlet), mezcla de concentrados y extractos y monitoreo del contenido final de polifenoles y capacidad antioxidante de los concentrados obtenidos.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 2(Pregrado),

*Equipo:* Pablo Carmona(Integrante); Sara Aguilera(Integrante); Luis Alejandro Castro(Integrante)

*Financiadores:* Institución del exterior / Dirección General de Investigación y Postgrado de la UCN / Apoyo financiero

*Palabras clave:* antioxidantes

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / antioxidantes en productos naturales

2008 - 2010

*Título:* PROVITIS.DGIP-Investigación, desarrollo e innovación en base a propóleos y vino tinto: diseño de un concentrado polifenólico con propiedades protectoras contra el stress oxidativo, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* El proyecto consistió en la recolección de 19 muestras de propóleso uruguayos, vinos chilenos, orujos y borras de vinos, a partir de los cuales se desarrollaron mezclas con alto contenido en polifenoles. La optimización de los procesos extractivos se hizo en base a medidas de la cantidad de fenoles totales (Folin Ciocalteu), capacidad antioxidantes (ABTS, DPPH) y medidas enzimáticas (xantin oxidasa). complementariamente, se investigaron los modos de unión y energías de unión por anclaje molecular de xantin oxidasa y los fenoles contenidos en los extractos.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 3(Pregrado),

*Equipo:* Patricia Pozo(Integrante); Sara Aguilera Morales(Integrante); Yisel Rodriguez(Integrante); Manuel Navero(Integrante); Katherine Avalos(Integrante)

*Financiadores:* Institución del exterior / Dirección General de Investigación y Extensión UCN / Apoyo financiero

*Palabras clave:* antioxidantes

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

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

2008 - 2010

*Título:* VITIS.UCN-MEL-Desarrollo de antioxidantes a partir de vinos chilenos, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* El proyecto tuvo como objetivo el desarrollo de extractos de productos naturales con alto valor agregado. Como actividades específicas tuvo: extracción de fenoles a partir de mezclas de vinos chilenos. Desarrollo de procesos extractivos, y analíticos del contenido y capacidad antioxidante por diferentes metodologías (Folin Ciolcateu, HPLC, HPLS-MS Índice de oxidación, DPPH, ABTS+) y enzimológicas (inhibición de enzimas claves de enfermedades : xantina oxidasa, COXII, COXI, LOX y FOS2). Estudios LBDD y SBDD de las estructuras y actividades.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 3(Pregrado),

*Equipo:* Sara Aguilera Morales(Integrante); Yisel Rodriguez(Integrante); Victor Kesternich(Integrante); Manuel Navero(Integrante); Katherine Avalos(Integrante); Ronald Nelson(Integrante)

*Financiadores:* Institución del exterior / Minera Escondida Ltda / Apoyo financiero

*Palabras clave:* vinos chilenos; antioxidantes

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

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

2004 - 2011

*Título:* NEURONACH.CYT-Exploración de nuevos agonistas nicotínicos con selectividad por subtipo y modelización computacional de la interacción ligando-receptor, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Existe un creciente interés en el desarrollo de agonistas para nAChRs neuronales debido a su potencial terapéutico como analgésicos y para el tratamiento de diferentes trastornos neurológicos y psiquiátricos relacionados con la alteración de la función colinérgica. Sin embargo, su potencial terapéutico, generalmente vinculado a la estimulación de los subtipos A4B2 y A7, está acompañado de una variedad de efectos secundarios no deseados, asociados fundamentalmente a la estimulación de los nAChRs ganglionares (principalmente A3B4). En este sentido el desarrollo de herramientas farmacológicas capaces de discriminar los diferentes subtipos de nAChRs abre la posibilidad de desarrollar nuevos agentes terapéuticos que eviten o disminuyan los efectos no deseados. La reciente publicación en el Protein Data Bank del modelo cristalográfico del complejo nicotina - proteína de unión de acetilcolina de caracol, abre la posibilidad de generar modelos computacionales de los diferentes subtipos de nAChRs neuronales y con éstos, calcular las energías de unión de diferentes estructuras moleculares. Por otra parte, existe una gran cantidad de datos experimentales que permiten construir bases de datos de constantes de afinidad tanto para A7 como para A4B2 de distintos derivados de los agonistas prototípicos ((-)-Nicotina, (-)-Citisina, (-)-Anatoxina-A y (-)-Epibatidina). En este contexto, el proyecto se enfoca hacia la modelización de la interacción receptor-ligando para diferentes subtipos de nAChRs, de manera tal que nos permita predecir la afinidad y especificidad de una serie de ligandos sintetizados con estructuras análogas a las (-) citisina la cual además fue tomada como prototipo para un tamizaje virtual que permitió proponer nuevos compuestos candidatos capaces de discriminar entre los diferentes nAChRs en estudio.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 1(Doctorado)

*Equipo:* Andres Abin(Responsable); Federico Dajas(Integrante)

*Financiadores:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Cooperación

*Palabras clave:* nicotínicos

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

## Producción científica/tecnológica

Me desempeño en actividades de investigación, desarrollo, innovación y extensión que vinculan áreas multidisciplinares como Bioinformática, Farmacoquímica, Ciencias de la vida e Informática. Instalé y dirijo el Centro de Bioinformática Estructural (CeBioinfo) del DETEMA-Facultad de Química-UdelaR, cuya función principal es la implementación de estrategias *in silico* y experimentales para la investigación, desarrollo e innovación de nuevos fármacos y macromoléculas biológicas asociadas a la salud humana. Investigo en el Diseño de Biomoléculas y Compuestos Bioactivos estudiando su estructura y propiedades fisicoquímicas para ser desarrollados como fitonutrientes, fitofármacos o fármacos para enfermedades bacterianas, micosis, parasitarias (Chagas, Toxoplasmosis), Cáncer, Gota, Inflamación, neurodegenerativas (Parkinson, Alzheimer, Problemas Cognitivos). Desarrollamos conocimiento sobre antioxidantes (fenoles, carotenoides) extraídos de productos naturales, aportando respuestas a su relación con los desbalances del stress oxidativo, enfermedades oculares y nutricionales. Sostenemos vínculos académicos regionales e internacionales: En Uruguay, con el IIBCE, Facultades de Química, Ciencias, Ingeniería e Institut Pasteur Montevideo. En Chile: USaCh, UChile, UCN, PUC, UAB. En Argentina: CIBIERG/UBA, Instituto de Parasitología Fátala Chabén. En Brasil FIOCRUZ y UFRJ; Costa Rica: EARTH; Suecia: U Uppsala; Francia: U Paris Sud. En Estados Unidos: U Birmingham-Alabama; Irlanda Trinity College Dublin; Alemania: Univ. Braunschweig, Berlin, OMS-PAHO. España:red CYTED IBERCAROT, Universidad de Sevilla, CSIC(Valencia), UK: University of Liverpool Realizamos

innovación y desarrollo con empresas uruguayas y chilenas: TEPYVE; Fundación Zonamérica; Sociedad Apícola Uruguaya; Red Apícola; Exportadores de Miel y Propóleos (Urimpex S.A.); DIPRODE, Cluster Apícola; Empresas Vitivinícolas (Loncomilla-San Javier -Chile, Carrau, productores), Bodegas Carrau y Boido, entre otras. Con sectores académicos y empresariales, nacionales e internacionales hemos gestionado y participamos en proyectos de investigación, desarrollo e innovación financiados por fuentes nacionales e internacionales. Soy responsable por la formación de recursos humanos, tarea altamente gratificante, tanto por la docencia directa como dirigiendo Tesis de grado y postgrado (4 doctorados, 2 maestrías y 4 grados finalizados, 4 postgrados y 4 grados en realización). Participo del cogobierno universitario: Directora Suplente DETEMA; Suplente por el orden docente del Consejo de la Facultad de Química, Titular Comisión de Dedicación Total y COAED. S y Comisión Coordinadora del Area(CCA)-Química- PEDECIBA, Coordinadora de cursos de postgrado-fisicoquímica y Comisiones de ingresos. Coordino la Maestría en Bioinformática UdelaR-PEDECIBA desde el 2009 y en la actualidad extendiendonos hacia el interior del país (Regional Norte, CURE) y el extranjero mediante del desarrollo de la modalidad semipresencial. Durante el 2008-2009, realicé una estadía sabática en la Universidad Católica del Norte, Antofagasta-Chile, convocada por el Programa de Mejoramiento de la Calidad y Equidad de la Educación Superior (MECESUP) para promover el desarrollo de la enseñanza, investigación e innovación en Química Farmacéutica, Química-Física y Bioinformática. Esta experiencia, altamente gratificante y formativa, me ha interiorizado del sistema de investigación e innovación chileno y con los sectores empresariales, académicos, agencias e instituciones de innovación. Siento una gran vocación por la Integración Participativa promoviendo actividades de extensión hacia el medio (Sector Productivo vitivinícola y apícola uruguayo y chileno) y tendiendo puentes entre los diferentes niveles de enseñanza, promoviendo actividades presenciales con docentes y estudiantes del Liceo No 1 IPOLL de Salto y Escuela Guatemala-Montevideo.

## Producción bibliográfica

### Artículos publicados

#### Arbitrados

Completo

B VERA; K. VAZQUEZ; C. MASCAYANO; R. TAPIA; V. ESPINOSA; J SOTO-DELGADO; C.O. SALAS; M. PAULINO ZUNINI  
Structural Analysis and Molecular Docking of Trypanocidal Aryloxy-quinones in Trypanothione and Glutathione Reductases: A Comparison with Biochemical Data. Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 35 8, p.: 1785 - 1803, 2017

*Palabras clave:* quinonas; tripanosomicidas; tripanotiona reductasa

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 07391102 ; DOI: 10.1080/07391102.2016.1195283



Completo

LÓPEZ C; ALZATE J; M. PAULINO ZUNINI; MELLA J; C.O. SALAS; R. TAPIA; J SOTO  
Combined Molecular Modelling and 3D-QSAR Study for Understanding the Inhibition of NQO1 by Heterocyclic Quinone Derivatives. Chemical Biology and Drug Design, 2017

*Palabras clave:* quinonas; cancer; NQO1

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Software

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 17470285

Completo

K. VAZQUEZ; M. PAULINO ZUNINI; C.O. SALAS; ZáRATE JJ; B VERA; RIVERA G  
Trypanothione Reductase: A Target for the Development of Anti-Trypanosoma cruzi drugs. Mini Reviews in Medicinal Chemistry, v.: 17, 2017

*Palabras clave:* chagas; quinonas

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 13895575 ; DOI: 10.2174/1389557517666170315145410



Completo

D CARVALHO; M. PAULINO ZUNINI; POLTICELLI F; WILLIAMS R; ABIN JA

Structural evidence of quercetin multi-target bioactivity: a reverse virtual screening strategy. European Journal of Pharmaceutical Sciences, 2017

*Palabras clave:* quercetina; Anclaje reverso; nuevas dianas

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Software

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 09280987



SCOPUS

Completo

M C SALAVERRY; A COSTÁBILE; S ECHAVERRIA; ESTELA CASTILLO; M. PAULINO ZUNINI; A. ESTÉVES

Identification of novel CAP superfamily protein members of Echinococcus granulosus protoscoleces. Acta Tropica, 2016

*Palabras clave:* Echinococcus granulosus

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 0001706X ; DOI: 10.1016/j.actatropica.2016.02.011



SCOPUS



Sistema Nacional de Investigadores

Completo

ALVAREDA E; DENIS P; IRIBARNE F; M. PAULINO ZUNINI

Bond dissociation energies and enthalpies of formation of flavonoids: a G4 and M06-2X investigation. Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1091, p.: 18 - 23, 2016

*Palabras clave:* Bond dissociation; flavonoids; G4; M06-2X

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 2210271X ; DOI: 10.1016/j.comptc.2016.06.021



SCOPUS



Completo

GONZÁLEZ Y; EZZATTI O; PAULINO ZUNINI M.

Unleashing the graphic processing units-based version of NAMD. Bioinformatics and Biology Insights, v.: 9656, p.: 639 - 650, 2016

*Palabras clave:* NAMD; GPU; APOA1

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Software

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 11779322 ; DOI: 10.1007/978-3-319-31744-1 56

SCOPUS



Completo

CH ESPINOSA-BUSTOS; J CALDERÓN; A CAÑETE; RA TAPIA; M FAUNDEZ; MJ TORRES; A AGUIRRE; M. PAULINO ZUNINI; CO SALAS

Synthesis and pharmacophore modelling of 2,6,9-trisubstituted purine derivatives and their potential role as apoptosis-inducing agents in cancer cell lines. Molecules, v.: 20 4, p.: 6808 - 6826, 2015

*Palabras clave:* purine; apoptosis; pharmacophore

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 14203049 ; DOI: 10.3390/molecules20046808

[http://www.mdpi.com/journal/molecules/sections/medicinal\\_chemistry](http://www.mdpi.com/journal/molecules/sections/medicinal_chemistry)



SCOPUS



Completo

R. CARRARO; F. IRIBARNE; M. PAULINO ZUNINI

Analysis of Cyclosporin A and a Set of Analogues as Inhibitors of a T. cruzi Cyclophilin by Docking and Molecular Dynamics. Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 2015

*Palabras clave:* cyclophilin ; chagas; linear interaction energy (LIE); molecular dynamics

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Guilderland, NY, USA ; *ISSN:* 07391102 ; *DOI:* 10.1080/07391102.2015.1038584

<http://dx.doi.org/10.1080/07391102.2015.1038584>



SCOPUS



Completo

K. VAZQUEZ; CH ESPINOSA-BUSTOS; J SOTO-DELGADO; RA TAPIA; J. VARELA; E BIRRIEL; RODRIGO SEGURA; JAIME PIZARRO; H. CERECETTO; M GONZALEZ; M. PAULINO ZUNINI; CO SALAS

New aryloxy-quinone derivatives as potential Anti-Chagasic agents: Synthesis, trypanosomicidal activity, electrochemical properties, pharmacophore elucidation and 3D-QSAR analysis. RSC Advances, 2015

*Palabras clave:* quinones; chagas

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Medicina Química

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

Medicina Química

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 20462069



SCOPUS

Completo

M. PAULINO ZUNINI; E. ALVAREDA; F. IRIBARNE; P. MIRANDA ; V. ESPINOSA; S. AGUILERA-MORALES; H. PARDO

Towards the understanding of the molecular basis for the inhibition of COX-1 and COX-2 by phenolic compounds present in Uruguayan propolis and grape pomace . Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 2015

*Palabras clave:* ciclooxigenase; antiinflammatory effect; phenols; flavonoids; propolis; grape pomace

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 07391102 ; *DOI:* 10.1080/07391102.2015.1124808

<http://www.jbsdonline.com/jbsd-taken-over-taylor-and-francis-c4319.html>



SCOPUS



Completo

M VEGA TEIJIDO; M. PAULINO ZUNINI; C. LOPEZ; M.J. RODRIGO

A theoretical study of CCD4a dioxygenase of citrus, a cleavage enzyme of carotenoids in plants. Revista Processos Químicos, v.: 9 18, p.: 163 - 163, 2015

*Palabras clave:* carotenoids; dioxygenase; citrus

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Goiania - Brazil ; *ISSN:* 19818521

Completo

E. ALVAREDA; P. MIRANDA ; V. ESPINOSA; H. PARDO; S. AGUILERA-MORALES; M. PAULINO ZUNINI

Antiinflammatory activity of phenolic compounds extracted from Uruguayan propolis and grape. Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 33 1, p.: 129 - 129, 2015

*Palabras clave:* phenols; flavonoids; antiinflammatory; grape pomace; propolis

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 07391102 ; *DOI:* 10.1080/07391102.2015.1032833

<http://dx.doi.org/10.1080/07391102.2015.1032833>



SCOPUS



Completo

M. PAULINO ZUNINI

PROVITIS: Un consorcio entre la Ciencia y la Producción. VOCES, v.: 464, 2015

*Palabras clave:* propolis; orujos de uvas

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Montevideo ; *ISSN:* 11303336



Completo

R. TAPIA; C.O. SALAS; K. VAZQUEZ; CH ESPINOSA-BUSTOS; J SOTO-DELGADO; J. VARELA; E BIRRIEL; H. CERECETTO; M GONZALEZ; M. PAULINO ZUNINI

Synthesis and biological characterization of new aryloxyindole-4,9-diones as potent trypanosomicidal agents. *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*, v.: 24 16, p.: 3919 - 3922, 2014

*Palabras clave:* indolquinonas; chagas; farmacóforo

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 0960894X

Ms. Ref. No.: BMCL-D-14-00714R1 Title: Synthesis and biological characterization of new aryloxyindole-4,9-diones as potent trypanosomicidal agents *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters* Dear Dr Tapia, I am pleased to notify you that your manuscript 'Synthesis and biological characterization of new aryloxyindole-4,9-diones as potent trypanosomicidal agents' has been accepted for publication in *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. When your paper is published on ScienceDirect, you want to make sure it gets the attention it deserves. To help you get your message across, Elsevier has developed a new, free service called AudioSlides: brief, webcast-style presentations that are shown (publicly available) next to your published article. This format gives you the opportunity to explain your research in your own words and attract interest. You will receive an invitation email to create an AudioSlides presentation shortly. For more information and examples, please visit <http://www.elsevier.com/audioslides>. Thank you for submitting your work to *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. With kind regards, Dale L. Boger, Ph.D. Editor-in-Chief *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*



Completo

A. MELÉNDEZ-MARTÍNEZ; M. PAULINO ZUNINI; C STINCO; P MAPELLI-BRAHM; X-D. WANG

STUDY OF THE TIME-COURSE CIS/TRANS (Z/E) ISOMERISATION OF LYCOPENE, PHYTOENE AND PHYTOFLUENE FROM TOMATO. TECHNOLOGICAL AND NUTRITIONAL IMPLICATIONS. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2014

*Palabras clave:* carotenoides, bioinformatica

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 00218561



Completo

G. ALVITE; N GARRIDO; A KUN; M. PAULINO ZUNINI; A. ESTÉVES

Towards an Understanding of Mesocestoides vogae Fatty Acid Binding Proteins' Roles. *PLoS ONE*, v.: 9 10, p.: 1 - 11, 2014

*Palabras clave:* FABPs; Mesocestoides Vogae

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Canada ; *ISSN:* 19326203



Completo

A. ESTÉVES; M. PAULINO ZUNINI

In silico studies of Echinococcus granulosus FABPs. *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics*, v.: 31 2, p.: 224 - 239, 2013

*Palabras clave:* E granulosus, FABPs, bioinformatica estructural

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 07391102 ; *DOI:* 10.1080/07391102.2012.698246

Completo

P. ESPERÓN; C. SCAZZOCCHIO ; M. PAULINO ZUNINI

In vitro and in silico analysis of the Aspergillus nidulans DNA-CreA repressor interactions. Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, 2013

*Palabras clave:* Zinc finger; DNA-protein interaction; TGEK Linker; Aspergillus nidulans

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, análisis conformacional

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* UK ; *ISSN:* 07391102 ; *DOI:* [Epub ahead of print] PMID: 24125468 [PubMed - a

[http://www.tandfonline.com/toc/tbsd20/current#\\_Ui4zvsYreul](http://www.tandfonline.com/toc/tbsd20/current#_Ui4zvsYreul)

08-Sep-2013 Dear Dr Paulino: Ref: In vitro and in silico analysis of the Aspergillus nidulans DNA-CreA repressor interactions We are pleased to accept your paper in its current form which will now be forwarded to the publisher for copy editing and typesetting. You will receive proofs for checking, and instructions for transfer of copyright in due course. The publisher also requests that proofs are checked through the publisher's tracking system and returned within 48 hours of receipt. Thank you for your contribution to Journal of Biomolecular Structure & Dynamics and we look forward to receiving further submissions from you. Sincerely, Professor Sarma Editor in Chief, Journal of Biomolecular Structure & Dynamics rhs07@albany.edu

## Sistema Nacional de Investigadores

Completo

J. TAKS; M. PAULINO ZUNINI

Flavonoides en Productos Naturales - Entrevista a Margot Paulino Zunini realizada por Javier Taks. Trama. Revista de Cultura y Patrimonio, v.: 3, p.: 86 - 99, 2011

*Palabras clave:* antioxidantes; marcela

*Areas del conocimiento:* Ciencias Sociales / Sociología / Antropología, Etnología / Antropología Social

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Montevideo ; *ISSN:* 16886348



Completo

M. PAULINO ZUNINI; C. ROJAS; S. DEPAULA; I. ELINGOLD; E. ALVAREDDA; M.B. CASANOVA; F. IRIBARNE; S. AGUILERA-MORALES; M. DUBIN

Phenolic contents and antioxidant activity in central southern Uruguayan propolis extracts.. Journal of the Chilean Chemical Society, v.: 55 1, p.: 141 - 146, 2010

*Palabras clave:* antioxidantes; propolis

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antichagásicas

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Chile ; *ISSN:* 07179707

Completo

A. ABIN-CARRIQUIRY; M. PAULINO ZUNINI; B. K. CASSELS; S. WONNACOTT; F. DAJAS

In silico characterization of cytisinoids docked into an Acetylcholine Binding Protein. . Bioorganic & Medicinal Chemistry, v.: 20, p.: 3683 - 3687, 2010

*Palabras clave:* nicotínicos; in silico

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Amsterdam ; *ISSN:* 09680896

Completo

F. IRIBARNE; M. PAULINO ZUNINI; S. AGUILERA-MORALES; O. TAPIA

Assaying phenothiazine derivatives as trypanothione reductase and glutathione reductase inhibitors by theoretical docking and Molecular Dynamics studies. Journal of molecular graphics & modelling, v.: 28, p.: 371 - 381, 2009

*Palabras clave:* Chaga's disease; Phenothiazines; trypanothione reductase; binding affinity; theoretical docking; molecular dynamics

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

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 10933263 ; DOI: 10.1016/j.jmgm.2009.09.003

[www.elsevier.com/locate/JMGM](http://www.elsevier.com/locate/JMGM)



SCOPUS



Completo

M. PAULINO ZUNINI; E.M. ALVAREDA; P. A. DENIS; E. J. BARREIRO; G.M. SPERANDIO DA SILVA; M. DUBIN ; C. GASTELLÚ; S. AGUILERA ; O. TAPIA

Studies of Tripanocidal (Inhibitory) Power of Naphthoquinones: Evaluation of Quantum Chemical Molecular Descriptors for Structure-activity Relationships. European Journal of Medical Chemistry, v.: 43 10, p.: 2238 - 2246, 2008

*Palabras clave:* naphthoquinones; trypanocides

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

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

*Medio de divulgación:* Internet ; ISSN: 02235234 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

F. IRIBARNE; H. CERECETTO; M. GONZÁLES; S. AGUILERA ; O. TAPIA; M. PAULINO ZUNINI

Interaction energies of nitrofurans with trypanothione reductase and glutathione reductase studied by molecular docking. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 818, p.: 7 - 22, 2007

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 01661280 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

R. CARRARO; J. BÚA; A. RUIZ; M. PAULINO ZUNINI

Modelling and study of cyclosporin A and related compounds complexes with a Trypanosoma cruzi cyclophilin. Journal of molecular graphics & modelling, v.: 26, p.: 48 - 61, 2007

*Palabras clave:* ciclofilina; Trypanosoma cruzi

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 10933263 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos

Es uno de los trabajos mas relevantes de mi producción



SCOPUS

Completo

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; M. DUBIN ; S. AGUILERA-MORALES; O. TAPIA; A.O.M. STOPPANI

The chemotherapy of Chaga's disease: An overview. Mini Reviews in Medicinal Chemistry, v.: 5, p.: 173 - 183, 2005

*Palabras clave:* chagas; quimioterapia del chagas

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 13895575 ; Idioma/Pais: Inglés/Holanda

Es uno de los trabajos mas relevantes de mi producción.



SCOPUS



Completo

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; M. HANSZ; N. HIKICHI; M. VEGA; G. SEOANE ; H. CERECETTO; R. DI MAIO; I. CARACELLI; I. ZUKERMAN-SCHPECTOR; C. OLEA-AZAR; P. MIRANDA ; M. BERRIMAN; A.H. FAIRLAMB ; O. TAPIA  
Computer assisted design of potentially active anti-trypanosomal compounds. . Journal of Molecular Structure, v.: 584, p.: 95 - 105, 2002

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00222860 ; Idioma/Pais: Inglés/Uruguay



SCOPUS

Completo

M. PAULINO ZUNINI; M. VEGA; P. ESPERÓN; C. SCAZZOCCHIO ; O. TAPIA

Modelling CreA protein-DNA recognition determinants. A molecular dynamics study of fully charged CreA-DNA model in water. . Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 584, p.: 225 - 242, 2002

*Palabras clave:* Aspergillus nidulans; CreA

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

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 01661280 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos

Es uno de los trabajos mas relevantes de mi producción



SCOPUS

Completo

F. IRIBARNE; M. PAULINO ZUNINI; S. AGUILERA ; M. MURPHY ; O. TAPIA

Docking and molecular dynamics studies at trypanothione reductase and glutathione reductase binding sites. Journal of Molecular Modeling, v.: 5, p.: 173 - 183, 2002

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 09485023 ; Idioma/Pais: Inglés/Uruguay

SCOPUS

Completo

G. A. ARTECA; M. PAULINO ZUNINI; C.T. REINMANN; O. TAPIA

Relaxation dynamics of biopolymers seeded with unfolded lysozyme transients in vacuo. The role of primary sequence in protein folding. Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 2, p.: 5259 - 5267, 2001

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 14639076 ; Idioma/Pais: Inglés/Suiza



SCOPUS

Completo

F. IRIBARNE; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

Hydride Transfer Transition Structure as an Unifying Redox Step for Describing the Branched Kinetics of Glutathione Reductase. Molecular-Electronic Antecedents. . Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 103, p.: 451 - 462, 2000

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

ISSN: 1432881X ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

G. ROXSTROM; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

Recognition determinants in T4«G4 mutant derived from a (5« GCGTGGGCGT-«4) oligomer in a Zif268-DNA complex. A molecular dynamics study of the fully charged complex in water. . Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 104, p.: 96 - 108, 2000

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

*ISSN:* 1432881X ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

A.O.M. STOPPANI ; S. GOIJMAN; M. DUBIN ; S.H. FERNÁNDEZ-VILLAMIL ; M.P. MOLINA PORTELA; A.M. BISCARDI; M. PAULINO ZUNINI

Cytotoxicity of lipophilic o-naphthoquinones: structure-activity relationships. Comparative biochemistry and physiology. Toxicology & pharmacology, v.: 7, p.: 1 - 16, 2000

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

*ISSN:* 15320456 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

## Sistema Nacional de Investigadores

Completo

V. PSZENNY ; S.O. ANGEL ; M. PAULINO ZUNINI; B. LEDESMA; E. GUARNERA ; A.M. RUIZ; E. BONTEMPI

Molecular cloning, sequencing and expression of a serine proteinase inhibitor gene from Toxoplasma gondii. . Molecular and Biochemical Parasitology, v.: 107, p.: 241 - 249, 2000

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 01666851 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

H. CERECETTO; R. DI MAIO; M. GONZALEZ ; M. RISSO; G. SAGRERA ; G. SEOANE ; A. DENICOLA ; G. PELUFFO; C. QUIJANO; A. O. M. STOPPANI; M. PAULINO ZUNINI; C. OLEA-AZAR; M. A. BASOMBRÍO

Synthesis and anti-trypanosomal evaluation of E-isomers of 5-nitro-2 furaldehyde and 5-nitrothiophene-2- carboxaldehyde semicarbazone derivatives. Structure-activity relationships. . European Journal of Medical Chemistry, v.: 35, p.: 343 - 350, 2000

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 02235234 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos



SCOPUS

Completo

M. PAULINO ZUNINI; A. ESTEVES; M. VEGA; G. TABARES ; R. EHRLICH; O. TAPIA

Modelling a 3D Structure for EgDf1 from Echinococcus granulosus. Putative epitopes, phosphorylation motifs and ligand. . Journal of Computer-Aided Molecular Design, v.: 12, p.: 351 - 360, 1998

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 0920654X ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

*Es uno de los trabajos mas relevantes de mi producción*



SCOPUS

Completo

G. ROXTROM; I. VELÁZQUEZ; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

Molecular Dynamics Simulation of a Zif268-DNA Complex in Water. Spatial Patterns and Fluctuations Sensed from a Nanosecond Trajectory. G. Journal of Chemical Physics, v.: 102, p.: 1828 - 1832, 1998

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

*ISSN:* 00219606 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Gran Bretaña

Completo

G. ROXSTROM; I. VELÁZQUEZ; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

DNA Structure and Fluctuations Sensed from a 1.1ns Molecular Dynamics TRajjectory of a Fully Charged Zif268-DNA Complex in Water. G. Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 2, p.: 301 - 302, 1998

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 07391102 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

H. CERECETTO; R. DI MAIO; G IBARRURI; G. SEOANE ; A. DENICOLA; C. QUIJANO; C PELUFFO; M. PAULINO ZUNINI

Synthesis and Anti-Trypanosomal Activity of Novel 5-Nitro-2-furaldehyde and 5-Nitrothiophene-2-carboxaldehyde Semicarbazones Derivatives. Farmaco, v.: 53, p.: 84 - 94, 1998

*Palabras clave:* anti tripanosoma; chagas; semicarbazonas

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Francia ; *ISSN:* 0014827X

Completo

A. ESTEVES; M. PAULINO ZUNINI; L. JOSEPH; R. EHRLICH

Remarks no the Phylogeny and Structure of Fatty Acid Binding Proteins from Parasitic Platyhelminths. International Journal for Parasitology, v.: 27, p.: 1013 - 1023, 1997

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 00207519 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda

Completo

W. DIAZ; J.M. AULLO; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

Transition structure and reactive complexes for hydride transfer in an isoalloxazine-nicotinamide complex. On the catalytic mechanism of a glutathione reductase. An ab initio MO SCF study. . Journal of Chemical Physics, v.: 204, p.: 195 - 203, 1996

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

*ISSN:* 00219606 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

I. CARACELLI; F.M.L.G. STAMATO; B. MESTER; M. PAULINO ZUNINI; H. CERECETTO

A new analogue of Nifurtimox. Acta Crystallographica Section C-Crystal Structure Communications, v.: 52, p.: 1281 - 1282, 1996

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 01082701 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

A.O.M. STOPPANI ; M. PAULINO ZUNINI; M. DUBIN

Oxygen radicals and the chemotherapy of Chagas`s disease: an overview. *Ciência e Cultura*, v.: 48 1 2, p.: 75 - 86, 1996

*Palabras clave:* free radicals; chaga´s disease

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00096725

[http://cienciaecultura.bvs.br/scielo.php?script=sci\\_serial&lng=en&pid=0009-6725&nrm=iso](http://cienciaecultura.bvs.br/scielo.php?script=sci_serial&lng=en&pid=0009-6725&nrm=iso)



Completo

M. PAULINO ZUNINI; F.M.L.G. STAMATO; R. GARRAT; C.M. SOARES

Computer assisted simulations and molecular graphics methods in molecular design. 2. Proteinases and Receptor and Transport Proteins. . *Molecular Engineering*, v.: 4, p.: 375 - 414, 1995

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 09255125 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

N. HIKICHI; M. PAULINO ZUNINI; M. HANSZ; O. TAPIA

A Molecular Dynamic Study of Structure of glutathione reductase.. *Journal of Molecular Structure*, v.: 335, p.: 243 - 254, 1995

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00222860 ; *Idioma/Pais:* Español/Estados Unidos



Completo

O. TAPIA; M. PAULINO ZUNINI; F.M.L.G. STAMATO

Computer assisted simulations and molecular graphics methods in molecular design. Theory and applications to enzyme active-site-directed drug design. . *Molecular Engineering*, v.: 3, p.: 377 - 414, 1994

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 09255125 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

M. PAULINO ZUNINI; M. HANSZ; N. HIKICHI; A.O.M. STOPPANI

Electronic Properties and Free Radical Production by Nitrofurans Compounds. . *Free Radical Research*, v.: 16, p.: 207, 1992

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 10715762 ; *Idioma/Pais:* Español/Estados Unidos

Completo

E. HORJALES; B. OLIVA ; F.M.L.G. STAMATO; M. PAULINO ZUNINI; O. NILSSON

A computer Model Built Structure of the T. Congolense Trypanothione Reductase in Complex with NADP. *Molecular Engineering*, v.: 1, p.: 357 - 375, 1992

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 09255125 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

M. PAULINO ZUNINI; F. STAMATO; A.O.M STOPPANI; O. TAPIA

Novel approach to the study of the mode of action of new antichagasic chemicals. *Memórias do Instituto Oswaldo Cruz*, v.: 87, p.: 76, 1992

*Palabras clave:* antichagasic; mode of action

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

*Medio de divulgación:* Papel ; ISSN: 00740276



Completo

M. PAULINO ZUNINI; M. HANSZ; N. HIKICHI; G. TABARES; MP MOLINA PORTELA; S.H. FERNANDEZ-VILLAMIL; C SREIDER; AOM STOPPANI

Propiedades Electrónicas y actividad redox de naftoquinonas. Anales de la Sociedad Científica Argentina, v.: 82 5, p.: 379 - 389, 1992

*Palabras clave:* naftoquinonas

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Buenos Aires Argentina ; *ISSN:* 00378437



Completo

M. DUBIN ; S. FERNÁNDEZ ; M. PAULINO ZUNINI; A.O.M. STOPPANI

Inhibition of Microsomal Lipid Peroxidation and Cytocrome P-450 Catalyzed Reactions by Nitrofurán Compounds. Free Radical Research, v.: 14, p.: 419 - 431, 1991

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 10715762 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

Completo

E. CIVILA; R. SALVATELLA; R. MANCEBO; R. ROSA; Y. BASMADJIAN; G. MENDARO; M. FERNÁNDEZ; G. SARROCA; M. PAULINO ZUNINI; S. CASSERONE; G. PÉREZ BORMIDA

Acción del ketoconazol sobre un modelo experimental agudo de infección por Trypanosoma cruzi. . Revista Uruguaya de Patología Clínica, v.: 22, p.: 405, 1990

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 00350559 ; *Idioma/Pais:* Español/Uruguay

Completo

E.L. COITIÑO; K. IRVING; J. RAMA; A. IGLESIAS; M. PAULINO ZUNINI; O.N. VENTURA

Theoretical studies of Hydrogen-bonded complexes : using semiempirical methods. . Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 69, p.: 405 - 415, 1990

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Facultad de Química - UdelaR ; *ISSN:* 01661280 ; *Idioma/Pais:* Español/Uruguay



Completo

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI; M. HANSZ; O.N. VENTURA

Molecular Modelling of Glutathione : A Comparison with Crystallographic Data. . Journal of Molecular Structure, v.: 210, p.: 467, 1990

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 00222860 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Bélgica



Sistema Nacional de Investigadores

Completo

B. MESTER; N. HIKICHI; M. HANSZ; M. PAULINO ZUNINI

Quantitative Structure Activity Relationships of 5-Nitrofurán Derivatives. Chromatographia, v.: 30, p.: 191, 1990

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 00095893 ; *Idioma/Pais:* Español/Suecia



Completo

M. PAULINO ZUNINI; R.M. SOSA

Estudio mecánico-cuántico de las conformaciones y espectros electrónicos de algunos ácidos hidroxámicos y sus iones. . Anales de La Facultad de Química de Montevideo, v.: 9, p.: 28, 1979

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *ISSN:* 07971400 ; *Idioma/Pais:* Español/Uruguay

## No Arbitrados

Completo

M. PAULINO ZUNINI

Una nueva estrategia en la lucha contra la Enfermedad de Chagas : modelado molecular adaptado al diseño de quimioterápicos de baja toxicidad. M.Paulino de Blumenfeld. Intercambio. 1 (1990) 4. Revista no Arbitrada. Intercâmbio, v.: 1, p.: 4, 1990

*Palabras clave:* Chagas, nuevos fármacos

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

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Montevideo ; *ISSN:* 0873366X

## Artículos aceptados

### Arbitrados

# Sistema Nacional de Investigadores

Completo

P. MIRANDA ; M. PAULINO ZUNINI; A. GAMBARO; A. ROASCIO; ÁLVARO W. MOMBRÚ; ALEJANDRA RODRÍGUEZ-HARALAMBIDES; MAURICIO ARGIMÓN; PATRICIA ZIMET; IRIS MIRABALLES; H. PARDO

Preparation and Characterization of Tannat Grape Pomace Extract Liposomes. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2016

*Palabras clave:* tannat; fenoles; orujos; liposomas

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

*ISSN:* 00218561



## Libros

Libro compilado , Revista

M. PAULINO ZUNINI; R. RADII; L. FLOHE

Reporte sobre la Enfermedad de Chagas del Grupo de Trabajo Científico. Programa Especial de Investigaciones y Enseñanzas sobre Enfermedades Tropicales (TDR) /SWG/09 . 2007. *Número de volúmenes:* 1, *Nro. de páginas:* 83,

*Editorial:* Organización Mundial de la Salud , Ginebra

*Palabras clave:* Enfermedad de Chagas

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

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Institución del exterior / World Health Organization, Panamerican Health Organization / Cooperación

[www.who.int/tdr](http://www.who.int/tdr)

## Capítulos de Libro

Capítulo de libro publicado

M. PAULINO ZUNINI

Creación y Evolución de dos posgrados Interdisciplinarios PEDECIBA-UdelaR: Maestría y Diploma de Especialización en Bioinformática , 2015

*Libro:* En-clave Inter: Educación superior e Interdisciplina. v.: 6, p.: 51 - 58,

*Organizadores:* Espacio Interdisciplinario de la Universidad de la República

*Editorial:* Espacio Interdisciplinario de la Universidad de la República , Montevideo

*Palabras clave:* Bioinformática

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática

*Medio de divulgación:* Papel; *ISSN/ISBN:* 9789974012912; *En prensa:* Si

Comisión Académica de Posgrado / Apoyo financiero; Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas /

Apoyo financiero

[http://www.ei.udelar.edu.uy/renderPage/index/pageld/976#heading\\_5866](http://www.ei.udelar.edu.uy/renderPage/index/pageld/976#heading_5866)

Capítulo de libro publicado

M. PAULINO ZUNINI

Theoretical and Experimental Pharmacological Approach to Chagas Disease: specific action of new drugs against flavoenzymes of the parasitic related organisms and the mammalian host , 1997

*Libro:* Molecular Biochemical and Immunological Approaches to Parasitic Diseases. . v.: 1, p.: 90 - 95,

*Organizadores:* Swedish Agency for Research Cooperation with Developing Countries (SAREC). Ricardo Ehrlich. Facultad de Ciencias, UdelaR, Montevideo, Uruguay

*Editorial:* Edilce , Montevideo

*Palabras clave:* chagas; antichagasic

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

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Swedish International Development Agency / Cooperación

Capítulo de libro publicado

M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

Computer simulations and molecular graphics modeling. The 3-D structure of transport proteins. , 1994

*Libro:* Biology of Parasitism. p.: 249 - 263, Uruguay

*Organizadores:* R. Ehrlich and A. Nieto

*Editorial:* Editorial Trilce , Montevideo

*Palabras clave:* Computer simulations, molecular graphics

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

*Medio de divulgación:* Papel; *Idioma/Pais:* Español/Uruguay;

*Financiación/Cooperación:* Institución del exterior / Cooperación

Capítulo de libro publicado

M. PAULINO ZUNINI; F.M.L.G. STAMATO; E. HORJALES; N. HIKICHI; M. HANSZ; B. OLIVA ; O. NILSSON ; O. TAPIA

Molecular Modelling as a tool to help design selective antichagasic drugs , 1992

*Libro:* The Chemistry of the XXI Century. Molecular Modelling.. p.: 131 - 152, Uruguay

*Organizadores:* Marco A.C. Nascimento

*Editorial:* Editorial World Scientific. , NY

*Palabras clave:* Molecular Modelling, antichagasic

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

*Medio de divulgación:* Papel; *Idioma/Pais:* Español/Uruguay;

*Financiación/Cooperación:* Institución del exterior / SAREC / Cooperación

## Documentos de Trabajo

Completo

M. PAULINO ZUNINI

*Palabras clave:* Bioinformática

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Completo

M. PAULINO ZUNINI

Informes finale de la fase de organización y fase I proyecto ChagaSpace. Agosto 2003, EARTH, Costa Rica y University of Alabama - Birmingham, CBSE, Agosto 2003. , 2003

*Serie:* 1 , 1 , Costa Rica

*Palabras clave:* ChagaSpace

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antichagásicas

*Medio de divulgación:* CD-Rom

Completo

M. PAULINO ZUNINI

Informe de avances de la fase de organización y fase I proyecto ChagaSpace. Agosto 2002, EARTH, Costa Rica y University of Alabama - Birmingham, CBSE , 2002

*Serie:* 1 , 1 , Costa Rica

*Palabras clave:* ChagaSpace

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antichagásicas

*Medio de divulgación:* CD-Rom

## Trabajos en eventos

Completo

Y GONZÁLES; P EZZATTI; M. PAULINO ZUNINI

Unleashing the Graphic Processing Units-based version of NAMD , 2015

*Evento:* Internacional , The 13th IEEE International Symposium on Parallel and Distributed Processing with Applications (IEEE ISPA-15) Helsinki, Finland, 20-22 August, 2015 , HELISNSKI , 2015

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* NAMD; ACCELERATED MOLECULAR DYNAMICS

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Enseñanza de postgrado en Bioinformática

Completo

M. PAULINO ZUNINI; M. VEGA; C. LOPEZ; M.J. RODRIGO

An In Silico Study of the Dioxygenases CCD4 family Substrates in Citrus , 2015

*Evento:* Internacional , Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Torino - Italia , 2015

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* carotenoids

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

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

[www.chitel2015.org](http://www.chitel2015.org)

Resumen

VEGA-TEIJIDO M; M. PAULINO ZUNINI; LOPEZ C; RODRIGO MJ

Modeling studies of CCD4a of citrus, a cleavage enzyme of carotenoids in plants , 2015

*Evento:* Internacional , Fitoquímicos en Agroalimentación Salud , Montevideo , 2015

*Palabras clave:* carotenoides; CCD4a ; Molecular modelling; molecular dynamics

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

CYTED / Apoyo financiero; Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

Resumen

ALVAREDA E; IRIBARNE F; ESPINOSA V; MIRANDA P; PARDO H; AGUILERA S; M. PAULINO ZUNINI

ACTIVIDAD ANTI-INFLAMATORIA DE COMPUESTOS FENÓLICOS EXTRAÍDOS DE PROPÓLEOS Y ORUJOS DE UVA URUGUAYOS: ENSAYOS IN VITRO E IN SILICO , 2015

*Evento:* Internacional , Fitoquímicos en Agroalimentación Salud , Montevideo , 2015

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* fenoles; ciclooxigenasa COX-2 COX-1

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

*Medio de divulgación:* Papel;

Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero; CYTED / Apoyo financiero



## Resumen

CARVALHO D; ABIN-CARRIQUIRY A; ARREDONDO F; POLITICELLI F; M. PAULINO ZUNINI

Identificación de blancos de acción molecular de quercetina mediante tamizaje reverso , 2015

*Evento:* Internacional , Fitoquímicos en Agroalimentación Salud , Montevideo , 2015

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* quercetina; tamizaje reverso

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

*Medio de divulgación:* Papel;

Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero; CYTED / Apoyo financiero

## Resumen

B VERA; K. VAZQUEZ; M. PAULINO ZUNINI; C.O. SALAS

Análisis estructural y acoplamiento molecular de ariloxiquinonas tripanosomicidas en tripanotión y glutatión reductasa: una comparación con datos bioquímicos , 2015

*Evento:* Internacional , Mexico D.F. , 2015

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* quinonas; chagas

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

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

B VERA; K. VAZQUEZ; M. PAULINO ZUNINI; C.O. SALAS

Acoplamiento molecular de quinonas tripanosomicidas en tripanotión y glutatión reductasa , 2015

*Evento:* Internacional , 1er CONGRESO INTERNACIONAL DE VECTORES Y DEL Trypanosoma cruzi: PANORAMA ACTUAL Y EXPECTATIVAS , Guanajato Mexico , 2015

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* quinonas; acoplamiento; tripanotión reductasa; Glutathion Reductasa

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

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

B VERA; K. VAZQUEZ; C.O. SALAS; M. PAULINO ZUNINI

Análisis estructural y acoplamiento molecular de ariloxiquinonas tripanosomicidas en tripanotión y glutatión reductasa , 2015

*Evento:* Internacional , Simposium en Química Medicinal y Farmacéutica , C.F. México , 2015

*Palabras clave:* quinonas; tripanocidas; tripanotión reductasa; Glutathion Reductasa

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

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen expandido

VEGA-TEIJIDO M; M. PAULINO ZUNINI; LOPEZ C; RODRIGO MJ

A theoretical study of CCD4a dioxygenase of citrus, a cleavage enzyme of carotenoids in plants. , 2015

*Evento:* Internacional , XVIII Simposio Brasileiro de Química Teórica - SBQT 2015 , Pirenópolis - GO Brasil

*Palabras clave:* carotenoides; CCD4a ; Molecular modelling; molecular dynamics

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero

Resumen

B VERA; V VILLAMIL; K. VAZQUEZ; J SOTO; C.O. SALAS; M. PAULINO ZUNINI

Análisis estructural y anclaje molecular de quinonas tripanosomicidas en tripanotion reductasa y glutation reductasa , 2014

*Evento:* Nacional , Encuentro de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 2014

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Anclaje reverso; tripanotiona reductasa; o-quinona; Glutation Reductasa; tripanosoma cruzi

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; R. CARRARO; F. IRIBARNE

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

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

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* cyclophilin ; cyclosporin; Trypanosoma cruzi

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Otros;

*Financiación/Cooperación:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

watoc2014.com

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; D CARVALHO; ABIN A; F ARREDONDO

Quercetin Target Identification by Reverse Virtual Screening , 2014

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

*Palabras clave:* quercetin; reverse virtual screening

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Otros;

*Financiación/Cooperación:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

watoc2014.com

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; P. ESPERÓN; C. SCAZZOCCHIO

Aspergillus nidulans DNA-CreA pattern recognition: in vitro and in silico studies , 2014

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

*Palabras clave:* Aspergillus nidulans; CreA

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Otros;

*Financiación/Cooperación:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

watoc2014.com

## Resumen

M. VEGA; C. LOPEZ; M.J. RODRIGO; M. PAULINO ZUNINI

Modeling, Docking and Molecular Dynamics studies of CCD4a with three carotenoids substrates. , 2014

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

*Palabras clave:* carotenoids; CCD4a

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Otros;

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

watoc2014.com

## Resumen

R. TAPIA; C.O. SALAS; K. VAZQUEZ; J SOTO; M. PAULINO ZUNINI; J. VARELA; M GONZALEZ; H. CERECETTO

2-AryloxyNaphthoquinone derivatives as anti-Chagasic agentS: study of trypanocidal effect, selectivity, pharmacophoric map and 3D-QSAR , 2014

*Evento:* Internacional , EFMC-ISMIC 2014 - XXIII International Symposium on Medicinal Chemistry (EFMC-ISMIC 2014) , Lisboa - Portugal , 2014

*Palabras clave:* 2-AryloxyNaphthoquinone; Chagas disease

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Facultad de Química - UDeLaR / Cooperación

<http://www.allconferences.com/c/efmc-ismc-2014-xxiii-international-symposium-on-medicinal-chemistry-lisbon-2014-september-07>

## Completo

K. VAZQUEZ; C.O. SALAS; M. PAULINO ZUNINI; R. TAPIA; C. ESPINOZA; J. VARELA; H. CERECETTO; M. GONZÁLES  
SINTESIS, ESTUDIOS DE DOCKING Y EVALUACION DE LA ACTIVIDAD TRIPANOSOMICIDA DE NUEVAS QUINONAS  
HETEROCICLICAS. , 2013

*Evento:* Internacional , XIX Simposio Nacional de Química Orgánica (XIX SINAQO) , La Plata Argentina , 2013

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Editorial:* J. Varela, H. Cerecetto, M. González.

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Extracción, análisis e identificación de carotenoides

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

R. TAPIA; C.O. SALAS; K. VAZQUEZ; CH. ESPINOSA; J. VARELA; M. GONZÁLES; H. CERECETTO; M. PAULINO ZUNINI

Synthesis and docking studies of new aryloxy heterocyclic quinones as potential trypanosomicidal agents , 2013

*Evento:* Internacional , IUPAC World Chemistry Congress 2013 on 11-16 August 2013 in Istanbul, Turkey , Istanbul , 2013

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* quinonas; tripanotiona reductasa; Trypanosoma cruzi

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, Diseño de compuestos Bioactivos

*Medio de divulgación:* Internet;

<http://www.AbstractAgent.com/2013iupac>

## Resumen

I. KREIMERMAN; E. SAVIO; P. OLIVER; M. PAULINO ZUNINI; H. ENGLER

Estudio in silico de moléculas marcadoras de astrocitos: potenciales agentes de diagnóstico PET para enfermedad de Alzheimer y otras encefalopatías , 2013

*Evento:* Nacional , ENAQUI Tercer Encuentro Nacional de Ciencias Químicas , Montevideo , 2013

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* PET; alzheimer; in silico

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

*Medio de divulgación:* CD-Rom;

Resumen

F. ZOPPOLO; E. SAVIO; P. OLIVER; M. PAULINO ZUNINI; H. ENGLER

Estudio in silico de ligandos de la GNMT: potenciales agentes de diagnóstico PET para el cáncer de próstata , 2013

*Evento:* Nacional , ENAQUI Tercer Encuentro Nacional de Ciencias Químicas , Montevideo , 2013

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* PET; cancer; in silico; GNMT Glycyl N metil transferasa

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* CD-Rom;

Resumen

R. RODRIGUEZ; E. PAZOS; M. PAULINO ZUNINI; M. VEGA; A. MELÉNDEZ-MARTÍNEZ

Estudios in silico de la interacción de BCO1 con carotenoides de origen vegetal , 2013

*Evento:* Nacional , +Biofísica Segundo Encuentro de la Sociedad de Biofísica - SUB , Montevideo , 2013

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* BCMO1; carotenoides, bioinformatica

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. VEGA; C. LOPEZ; M.J. RODRIGO; M. PAULINO ZUNINI

Modelado por Homología, Anclaje y Dinámica Molecular de tres Dioxigenasas de Rotura de Carotenoides de Cítricos de la Subfamilia CCD4 , 2013

*Evento:* Nacional , +Biofísica Segundo Encuentro de la Sociedad de Biofísica - SUB , 2013

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* CCDs; carotenoides, bioinformatica; anclaje; dinámica molecular

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. ALVAREDA; P. MIRANDA ; V. ESPINOSA; H. PARDO; S. AGUILERA-MORALES; M. PAULINO ZUNINI

Antiinflammatory Activity of Phenolic Compounds extracted from Uruguayan Propolis and Grape (Vitis Vinifera) Pomace: In Vitro and In Silico Assays , 2013

*Evento:* Nacional , +Biofísica Segundo Encuentro de la Sociedad de Biofísica - SUB , 2013

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* COXII; antioxidantes, fenoles; docking

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

Resumen

P. ESPERÓN; C. SCAZZOCCHIO; M. PAULINO ZUNINI

Aspergillus nidulans DNA-CreA pattern recognition: in vitro and in silico studies , 2013

*Evento:* Nacional , +Biofísica Segundo Encuentro de la Sociedad de Biofísica - SUB , Montevideo , 2013

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* CreA; Aspergillus nidulans; docking; molecular dynamics; pattern recognition

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen expandido

A. MELÉNDEZ-MARTÍNEZ; M. PAULINO ZUNINI; C. STINCO ; X-D. WANG

STUDY OF THE TIME-COURSE CIS/TRANS ISOMERISATION OF LYCOPENE, PHYTOENE AND PHYTOFLUENE FROM TOMATO , 2013

*Evento:* Internacional , Pigments In Foods VII , Novara, Italia , 2013

*Anales/Proceedings:* "Pigments in Foods VII" Congress, held in Novara, Italy, on 18-21 June 2013Arbitrado: SI

*Palabras clave:* carotenoides

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, análisis conformacional

*Medio de divulgación:* CD-Rom;

*Financiación/Cooperación:* Institución del exterior / Red Iberoamericana de Carotenoides - CYTED / Cooperación

(<http://pif2013.org/>)

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; E. ALVAREDA; V. ESPINOSA; L. CALDERÓN

PREDICCIÓN DE TIEMPOS DE RETENCIÓN CROMATOGRÁFICOS DE FENOLES EN PROPÓLEOS UTILIZANDO MOE-QSAR y MOE-GA , 2012

*Evento:* Regional , XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 2012

*Anales/Proceedings:* Resúmenes de las XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , 60 , 60Arbitrado: SI

*Editorial:* ISSN: 1688-9819 XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias © SUB , Montevideo

*Palabras clave:* qsar, fenoles

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel; ISSN/ISBN: 16889819;

*Financiación/Cooperación:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Resumen

A. BOADO; G. SILVA; J.A. ABIN; M. PAULINO ZUNINI

Nuevos agonistas de receptores nicotínicos de acetil colina obtenidos por QSAR y Filtrado Virtual con Farmacóforo , 2012

*Evento:* Regional , XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 2012

*Anales/Proceedings:* Resúmenes de las XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , 62 , 62Arbitrado: SI

*Editorial:* ISSN: 1688-9819 XIV Jornadas de la SUB © Sociedad Uruguaya de Biociencias , Montevideo

*Palabras clave:* nicotínicos, qsar, farmacóforo

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel; ISSN/ISBN: 16889819;

*Financiación/Cooperación:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Resumen

M. PEARCE; A. ROASCIO; A. GAMBARO; H. PARDO; M. PAULINO ZUNINI

Desarrollo y caracterización de antioxidantes encapsulados a partir de orujo de uva. , 2012

*Evento:* Regional , XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 2012

*Anales/Proceedings:* Resúmenes de las XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , 122 , 122Arbitrado: SI

*Editorial:* ISSN: 1688-9819 XIV Jornadas de la SUB © Sociedad Uruguaya de Biociencias , Montevideo

*Palabras clave:* orujos, liposomas, antioxidantes

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / procesos extractivos, analisis de antioxidantes, liposomacion

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Resumen

P. MIRANDA ; C. ZABALETA; E. BOIDO; H. PARDO; M. PAULINO ZUNINI

Estudio farmacofórico de fenoles de uvas y su anclaje a Xantina Oxidasa , 2012

*Evento:* Regional , XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 2012

*Anales/Proceedings:* Resúmenes de las XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , 43 , 43Arbitrado: SI

*Editorial:* ISSN: 1688-9819 XIV Jornadas de la SUB © Sociedad Uruguaya de Biociencias , Montevideo

*Palabras clave:* xantin oxidasa, fenoles, docking

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, docking

*Medio de divulgación:* Papel; ISSN/ISBN: 16889819;

*Financiación/Cooperación:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Resumen

A. ESTÉVES; M. PAULINO ZUNINI

In silico studies of Echinococcus granulosus FABPs - fatty acid interactions , 2011

*Evento:* Nacional , ENAQUI 2011 , Montevideo , 2011

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Echinococcus granulosus; FABPs

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; M. PEARCE; A. ROASCIO; M. TAVOLARA; Y. RODRIGUEZ; V. ESPINOSA; S. AGUILERA-MORALES

Desarrollo y caracterización de antioxidantes encapsulados , 2011

*Evento:* Nacional , ENAQUI 2011 , Montevideo , 2011

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* antioxidantes, orujos de uva tannat, liposomado

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. DUBIN; M.E. DI ROSSO; M.L. BARREIRO ARCOS; I. ELINGOLD; M. PAULINO ZUNINI; E. DA SILVA; G. CREMASCHI

Estudio de citotoxicidad de naftofuranquinonas sobre el linfoma T murino EL-4 , 2010

*Evento:* Regional , Oncology Meeting , Buenos Aires , 2010

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* naftofuranquinonas; citotoxicidad

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica de los procesos cancerosos

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; J.A. ABIN; B.K. CASSELS; S. WONNACOTT; F. DAJAS

Estudio in silico de la interacción de citisinoides con la proteína de unión a acetilcolina , 2010

*Evento:* Nacional , Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias. Sección Biotecnología. , Maldonado , 2010

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* agonistas nicotínicos; docking

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; A. ESTÉVES

Modelado por homología y estudio comparativo por anclaje y dinámica molecular de la interacción entre ácidos grasos y las proteínas . EgFABP1 y EgFABP2 , 2010

*Evento:* Nacional , Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias. Sección Bioinformática , Maldonado , 2010

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* FABPs; docking; dinámica molecular

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Resumen

G. ALVITE; A. KUHN ; M. PAULINO ZUNINI; A. ESTÉVES

FATTY ACID BINDING PROTEINS FROM CESTODES , 2010

*Evento:* Internacional , 51st International Conference on the Biosciences of Lipids , Bilbao España , 2010

*Palabras clave:* cestodes FABPs

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

L.A. CASTRO; S. AGUILERA-MORALES; F. IRIBARNE; M. PAULINO ZUNINI

In silico studies of sesquiterpene lactones with inhibitory activity of Nuclear Factor kappa B , 2010

*Evento:* Internacional , ISCB Latin-America , Montevideo , 2010

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* latonas sesquiterpénicas; factor nuclear kappa beta

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

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Resumen

E. ALVAREDA; I. ELINGOLD; M. CASANOVA; C. ROJAS; M. DUBIN; M. PAULINO ZUNINI

Medidas de la capacidad antioxidante en extractos de propóleos uruguayos , 2007

*Evento:* Internacional , I Latin American Meeting on Medicinal Chemistry , Montevideo , 2007

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* antioxidantes; propoleos uruguayos

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales

*Medio de divulgación:* Papel;

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero; Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; L. CALDERÓN; E. ALVAREDA; C. ROJAS; S. AGUILERA-MORALES

Estudios QSAR, Screening Virtual y "Docking" a Xantina Oxidasa de Polifenoles presentes en Productos Naturales , 2007

*Evento:* Internacional , I Latin American Meeting on Medicinal Chemistry , Montevideo , 2007

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* xantina oxidasa, fenoles, docking

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

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

M.C. DONNAMARIA; M. PAULINO ZUNINI; S.N. MONACHESI; Z. CATALDI; F. LAGE

Modelización biomolecular de hormonas neuroendocrinas en soluciones acuosas y fisiológicas , 2006

*Evento:* Nacional , XXXV Annual Meeting of the Argentinean Biophysical Society , Santa fé, Rosario, Argentina , 2006

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* hormonas neuroendócrinas

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

E. ALVAREDA; M. CEDRÉS-FERNÁNDEZ; R. CARRARO; M. PAULINO ZUNINI

Estudios QSAR, PCA y de Screenig Virtual de polifenoles presentes en mieles, propóleos, marcela, té verde y carqueja , 2006

*Evento:* Internacional , V Reunión de la Sociedad Latinoamericana de Fitoquímica y I Congreso de Fitoterápicos del Mercosur , Montevideo , 2006

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* antioxidantes; propóleos

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel;

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

## Resumen

M. PAULINO ZUNINI; C. DONNAMARÍA; R. CARRARO; S.N. MONACHESI; Z. CATALDI; F. LAGE

Modeling of biopeptides in physiological solutions. molecular dynamics simulations , 2006

*Evento:* Internacional , Medynfinol. XV Conference on Nonequilibrium Statistical Mechanics and Nonlinear Physics. , 2006

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* hormonas neuroendocrinas; dinámica molecular

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

*Medio de divulgación:* Papel;

## Completo

F. IRIBARNE; S. AGUILERA-MORALES; M. PAULINO ZUNINI

Measuring Binding Affinities of Phenothiazines to Trypanothione Reductase And Glutathione Reductase By Theoretical Docking And Molecular Dynamics , 2005

*Evento:* Internacional , Annual International Meeting 2005 Membranes and Membrane Proteins , Dublin , 2005

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Phenothiazines; trypanothione reductase; glutathione reductase

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel;

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero; Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

## Resumen

M. PAULINO ZUNINI; E. ALVAREDA; P. A. DENIS; M. DUBIN; C. GASTELLU; S. AGUILERA-MORALES; A.O.M. STOPPANI

Structure-activity relationships of trypanocides , 2005

*Evento:* Internacional , Annual International Meeting 2005 Membranes and Membrane Proteins , Dublin , 2005

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Editorial:* E.J. Barreiro, M. Dubin, C. Gastellu, S. Aguilera and A. O. M. Stoppiani

*Palabras clave:* trypanocides; QSAR

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel;

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero; Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero



Resumen

R. CARRARO; J. BÚA; A.RUIZ; M. PAULINO ZUNINI

Modelling and study of cyclosporin A and related compounds in complexes with T. cruzi and human cyclophilins , 2005

*Evento:* Internacional , MGMS Annual International Meeting 2005 Membranes and Membrane Proteins , 2005

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Editorial:* . R. Carraro, J. Búa, A. Ruiz

*Palabras clave:* cyclosporin; cyclophilin ; Trypanosoma cruzi

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel;

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero; Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

Resumen

E. ALVAREDA; M. CEDRÉS-FERNÁNDEZ; L. SCHODERLE; C. MATONTE; L. CALDERÓN; M. PAULINO ZUNINI

Estudios QSAR de polifenoles presentes en mieles y propóleos , 2005

*Evento:* Regional , Primer Congreso de Apicultura del Mercosur , Maldonado , 2005

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* antioxidantes propoleos fenoles

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel;

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

Resumen

C. GUIDA; M. PAULINO ZUNINI; C. PAVETO; P.A. DENIS; L. CALDERÓN; S. AGUILERA-MORALES; H.TORRES; M.M. FLAWIÁ

Anti-Trypanosoma cruzi activity of green tea (Camellia sinensis) catechins. Structure Activity Relationship , 2004

*Evento:* Internacional , Advances in synthetic, Combinatorial and Medicinal Chemistry , Moscú , 2004

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Camellia sinensis; Té verde; catequinas; Trypanosoma cruzi

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel;

*Financiación/Cooperación:* Institución del exterior / National Aeronautics and Space Administration / Apoyo financiero

Resumen

G.A. GARCÍA; P.A. GARAVAGLIA; M. PAULINO ZUNINI; T. MINNING; N. AINCIART; M. POTENZAA; A. M. RUIZ

Caracterización de una probable enzima del metabolismo de tioles del Trypanosoma cruzi , 2003

*Evento:* Internacional , . García, G.A.; Garavaglia, P.A.; Paulino, M.; Minning, T.; Ainciart, N.; Potenza, M.; Ruiz, A.M. Federacion Latinoamericana de Parasitología (FLAP), XVI Congreso Latinoamericano de Parasitología , La Paz , 2003

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Editorial:* . García, G.A.; Garavaglia, P.A.; Paulino, M.; Minning, T.; Ainciart, N.; Potenza, M.; Ruiz, A.M

*Palabras clave:* tioles; Trypanosoma cruzi

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Enzimología del Trypanosoma cruzi

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; L. LAFON; S. SEPÚLVEDA-BOZA; S. AGUILERA-MORALES; F. DAJAS

Relaciones Estructura-Actividad y estudio del Mecanismo de Acción de Flavonoides con propiedades reguladoras de la sobrevivencia y muerte celular , 2002

*Evento:* Internacional , XVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Montevideo , 2002

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* QSAR; flavonoides; muerte celular

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

A. GARCIA OTERO; F. IRIBARNE; E. CABRERA; H. CERECETTO; R. DI MAIO; S. AGUILERA-MORALES; M. MURPHY; M. PAULINO ZUNINI

Estudios de farmacología Molecular de Compuestos Bioactivos en Tripanosomatideos , 2002

*Evento:* Nacional , X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 2002

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* tripanosomatideos; bioactivos

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

F. IRIBARNE; A. GARCIA OTERO; H. CERECETTO; M. GONZÁLES; S. AGUILERA-MORALES; M. MURPHY; M. PAULINO ZUNINI

Estudios de anclaje de compuestos orgánicos adaptables a los sitios de tripanotiona y glutatión reductasas , 2002

*Evento:* Internacional , X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 2002

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* anclaje; tripanotiona reductasa; Glutation Reductasa

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; A. GARCIA OTERO; E. ALVAREDA; E. CABRERA; H. CERECETTO; R. DI MAIO; S. AGUILERA-MORALES; M. MURPHY; C. GASTELLU

Molecular pharmacology studies on anti-trypanosomal active compounds , 2002

*Evento:* Internacional , XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) , 2002

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* anti-trypanosome

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; A. GARCIA OTERO; H. CERECETTO; S. AGUILERA-MORALES; M. MURPHY

Docking studies of nitrofurán compounds in trypanothione and glutathione reductases active sites: A graphical analysis , 2002

*Evento:* Internacional , XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) , Montevideo , 2002

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* trypanothione reductase; glutathione reductase

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

F. IRIBARNE; A. GARCIA OTERO; E. ALVAREDA; S. AGUILERA-MORALES; M. PAULINO ZUNINI

Estudios de docking de compuestos fenotiazinicos en tripanotiona y glutatión reductasa: Un análisis gráfico , 2002

*Evento:* Nacional , la Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular , Montevideo , 2002

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* fenotiazinas; Glutation Reductasa; tripanotiona reductasa

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

#### Resumen

E. ALVAREDA; F. IRIBARNE; A. GARCIA OTERO; A.O.M STOPPANI; M. PAULINO ZUNINI

Relaciones Estructura-Actividad para o-naftoquinonas tripanocidas , 2002

*Evento:* Local , la Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular , Montevideo , 2002

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* o-naftoquinonas; QSAR

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

F. IRIBARNE; M. PAULINO ZUNINI; S. AGUILERA-MORALES; A.O.M STOPPANI

Estudio de docking de derivados fenotiazinicos en los sitios activos de tripanotiona reductasa y glutathion reductasa , 2001

*Evento:* Internacional , XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) , Toulouse Francia , 2001

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* fenotiazinas; tripanotiona reductasa; Glutathion Reductasa

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

#### Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; S. AGUILERA-MORALES; M. MURPHY; O. TAPIA

Estudios de docking y dinámica molecular en los sitios de unión de tripanotiona reductasa y glutathion reductasa , 2000

*Evento:* Internacional , XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) , Caxambu. Minas Gerais. Brasil , 2000

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* docking; dinámica molecular; tripanotiona reductasa; Glutathion Reductasa

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; M. HANSZ; J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR; I. CARACELLI; G. SEOANE; H. CERECETTO; C. OLEA-AZAR; A.O.M STOPPANI; M. BERRIMAN; A.H. FAIRLAMB ; O. TAPIA

Diseño asistido por computadora de compuestos tripanosomatideos potencialmente activos , 2000

*Evento:* Internacional , XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) , Caxambú-Minas Gerais - Brasil , 2000

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* anti-tripanosoma

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

F. IRIBARNE; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

Proton relays at the N-site and C-site of glutathione reductase. Molecular electronic antecedents for a sequentially-ordered mechanism , 1998

*Evento:* Internacional , Third European Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics , Granada - Spain , 1998

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* proton relay; trypanothione reductase N-site; glutathione reductase C-site

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; P. ESPERÓN; M. VEGA; M. VITAL; C. SCAZZOCCHIO

Theoretical and experimental studies of interaction between CreA and DNA target in *Aspergillus nidulans* , 1998

*Evento:* Internacional , VII Congreso Iberoamericano de Biología Celular , Montevideo , 1998

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* CreA; DNA; *Aspergillus nidulans*

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

Resumen

J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR; M. PAULINO ZUNINI; I. CARACELLI; M. HANSZ; H. CERECETTO; G. SEOANE; R. DI MAIO; O. TAPIA

Crystal structure of trypanothione analogues designed to fit the active site: Comparison between optimized and docked structures , 1997

*Evento:* Nacional , 20a Reuniao Anual. SBQ , Pocos das Caldas - Brasil , 1997

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* crystal structure; trypanothione reductase; docking

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

*Medio de divulgación:* Papel;

## Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; N. HIKICHI; M. HANSZ; M. VEGA; O. TAPIA

Structural Aspects of Specificity in Trypanothione and Glutathione Reductase Binding Sites and the design of new compounds with potential and trypanosomal activity , 1997

*Evento:* Internacional , 6th COST meeting on Anti Parasite Chemotherapy , Leuven - Belgium , 1997

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* trypanothione reductase; glutathione reductase; *Trypanosoma cruzi*

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; I. CARACELLI; M. HANSZ; F. FROLOW; H. CERECETTO; G. SEOANE; O. TAPIA

Crystal structures of trypanothione analogues designed to fit the active site: Comparison between optimized geometries and docked structures , 1997

*Evento:* Internacional , 6th COST meeting on Anti Parasite Chemotherapy , Leuven - Belgium , 1997

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* crystal structure; docking; trypanothione analogues

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

Resumen

R. DI MAIO; M. PAULINO ZUNINI; G. SEOANE; H. CERECETTO; C. OLEA-AZAR; M. HANSZ; O. TAPIA

Activity Physicochemical Properties relationships of Nitrofurans Analogues , 1997

*Evento:* Nacional , 20a Reuniao Anual. SBQ , Pocos das Caldas - Brasil , 1997

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* nifurtimox; QSAR

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; R. DI MAIO; G. SEOANE; H. CERECETTO; M. RISSO; A. DENICOLA; C. QUIJANO; G. PELUFFO; M.A. BASSOMBRIO

Síntesis de Potenciales Inhibidores de Trypanothione Reductasa. Semicarbazonas de Furfural y de Tiofencarbaldehído. , 1997

*Evento:* Nacional , XI Simposio de Investigadores ARgentinos de Química Orgánica , Córdoba - Argentina , 1997

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* semicarbazonas; tiofenilcarbaldehído; tripanotiona reductasa

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE

Possible role of proton relays in the electronic mechanism of glutathione reductase , 1997

*Evento:* Nacional , IX Simposio Brasileiro de Química Teórica , Caxambú - Brasil , 1997

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* proton relay; glutathione reductase

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

I. CARACELLI; M. PAULINO ZUNINI; M. HANSZ; F. IRIBARNE; H. CERECETTO; R. DI MAIO; G. SEOANE; J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR; O. TAPIA

Complexes of T. cruzi: Trypanothione Reductase and 5-nitrofurán derivatives, a theoretical study , 1997

*Evento:* Nacional , XIV Reuniao da Sociedade Brasileira de Cristalografía , Sao Carlos - Brasil , 1997

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* nitrofuranos; trypanothione reductase; Trypanosoma cruzi

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

H. CERECETTO; R. DI MAIO; M. GONZALEZ; A. DENICOLA; G. PELUFFO; C. QUIJANO; AM. ATRIA; C. OLEA-AZAR; M. HANSZ; M. PAULINO ZUNINI

Activity-physicochemical properties relationships of nifurtimox analogues , 1997

*Evento:* Internacional , 1 st Congress of Pharmaceutocal Sciences , Ribeirão Preto - SP - Brasil , 1997

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* SAR; chagas; nifurtimox

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR; G. FINAI; M. PAULINO ZUNINI; I. CARACELLI; M.T.C. BARCELLOS; A. DA CUNHA PINTO

Crystal structure of 7-trifluoromethyl-isatin , 1996

*Evento:* Internacional , 19a Reuniao Anual da SBQ , Sao Paulo , 1996

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* 7-trifluormrthyl isatin; crystal structure

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

J ZUCKERMANN-SPECTOR; M. PAULINO ZUNINI; I. CARACELLI; M. HANSZ; H. CERECETTO; R. DI MAIO; G. SEOANE; O. TAPIA

Crystal Structure and Targeted designed trypanothione analogues: A comparison , 1996

*Evento:* Internacional , WATOC , Jerusalem Israel , 1996

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* trypanothione reductase; crystal

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI

Estudios Dinámicos del mutante G446G de la enzima glutathione reductasa , 1995

*Evento:* Nacional , VII Jornadas Científicas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 1995

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Glutathione Reductasa; dinámica molecular

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; G. SEOANE; H. CERECETTO; M. GONZÁLES; R. DI MAIO; G. IBARRURI

Obtención de nuevas drogas con posible actividad antichagásica , 1995

*Evento:* Nacional , VII Jornadas Científicas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 1995

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* antichagasicas

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; N. HIKICHI; M. HANSZ; M. VEGA; O. TAPIA

Comparison of glutathione reductase and trypanothione reductase binding sites , 1995

*Evento:* Internacional , XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Pucon - Chile , 1995

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* glutathione reductase; trypanothione reductase

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. HANSZ; M. PAULINO ZUNINI; M.P. MOLINA PORTELA; S.H. FERNÁNDEZ-VILLAMIL ; A.O.M STOPPANI

Estructura-actividad en naftoquinonas , 1995

*Evento:* Internacional , XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Pucon - Chile , 1995

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* o-naftoquinonas; QSAR

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; G. ROXSTROM; I. VELAZQUEZ; O. TAPIA

Perturbation-relaxation molecular dynamics simulations of zinc-finger protein ZIF268 , 1995

*Evento:* Internacional , XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Pucon - Chile , 1995

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* molecular dynamics; ZIF268; Zinc finger

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

N. HIKICHI; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

Molecular dynamics study of mutant G418W of glutathione reductase , 1995

*Evento:* Internacional , XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , Pucon - Chile , 2995

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* GR G418W; molecular dynamics

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; A. ESTÉVES; B. DELLAGIOVANNA; G. TABARES; R. EHRLICH

A developmentaly gene of Echiococcus granulosus codes for a 1.5. kilodalton polypeptide related to fattu acid binding protein , 1994

*Evento:* Internacional , Santiago Southern Summer Syposium , Santiago de Chile , 1994

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Echinococcus granulosus; FABPs

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; M. HANSZ; N. HIKICHI; G. TABARES; M.P. MOLINA PORTELA; S.H. FERNANDEZ-VILLAMIL; A.O.M STOPPANI

Relacion Estructura-Actividad en naftoquinonas lipofilicas , 1994

*Evento:* Nacional , XX Congreso Argentino de Química , Cordoba - Argentina , 1994

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* o-naftoquinonas; QSAR

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; D. OFSIEVICH; O. TAPIA

Interacción de 2,4,6-trinitrobencensulfonato con glutation reductaa , 1993

*Evento:* Internacional , I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana , Montevideo , 1993

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* 2,4,6.trinitrobencensulfonato; glutathione reductase

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI; M. HANSZ; F. STAMATO; O. TAPIA

Comparación de los sitios de unión en glutatión reductasa y tripanotona reductasa , 1993

*Evento:* Internacional , I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana , Montevideo , 1993

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* tripanotona reductasa; Glutation Reductasa

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; M. KANN; O. TAPIA

Unión de nitrofuranos con sustituyentes tipo espermidina y tripanotona reductasa , 1993

*Evento:* Internacional , I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana , Montevideo , 1993

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* espermidina; tripanotona reductasa

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI; M. HANSZ; O. TAPIA

Dinamica molecular de glutatión reductasa en el diseño de drogas antichagasicas selectivas , 1993

*Evento:* Internacional , I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana , Montevideo , 1993

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* dinámica molecular; Glutation Reductasa; antichagasicas

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI; M. HANSZ; F. STAMATO; A.O.M STOPPANI

Relaciones estructura-actividad y binding a glutatión reductasa de naftoquinonas , 1993

*Evento:* Internacional , I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana , Montevideo , 1993

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* o-naftoquinonas; Glutation Reductasa; QSAR

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

N. HIKICHI; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

A molecular dynamics study of the structure of glutathione reductase , 1993

*Evento:* Nacional , VI Simposio Brasileiro de Química Teórica , Caxambú - Brasil , 1993

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* molecular dynamics; glutathione reductase

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Sistema Nacional de Investigadores



Resumen

M. PAULINO ZUNINI; M. VEGA; F. IRIBARNE; O. TAPIA

Study of disulfide specificity in Trypanothione reductase , 1993

*Evento:* Nacional , VII Simposio Brasileiro de Química Teórica , Caxambú - Brasil , 1993

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* disulfide; trypanothione reductase

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

Computer simulations and molecular graphics modelling. The 3D structures of transport proteins , 1993

*Evento:* Internacional , The International Workshop on biology of Parasitism , Maldonado - Solis , 1993

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* molecular graphics modelling; 3D structures; transport proteins; parasitism

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; A. ESTÉVES; B. DELLAGIOVANNA; G. TABARES; R. EHRLICH; O. TAPIA

Molecular Modelling and Dynamics of EgDF1 , 1993

*Evento:* Internacional , The International Workshop on biology of Parasitism , Maldonado - Solis , 1993

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* EgDf1; molecular dynamics; fatty acid; carrier proteins

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; M. VEGA; G BOUGARIN; O. TAPIA

Estudio de la especificidad de sustratos disulfuro de tripanotiona reductasa , 1993

*Evento:* Internacional , I Congreso de la Federación Farmacéutica Sudamericana , Montevideo , 1993

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* tripanotiona reductasa

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; F. IRIBARNE; M. VEGA; G BOUGARIN; O. TAPIA

Study of substrate specificity in trypanothione reductase, , 1993

*Evento:* Internacional , VII Simposio Brasileiro de Química Teórica , Caxambú – Brasil , 1993

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* disulfide specificity

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

Resumen

G. SEOANE; H. CERECETTO; M. GONZÁLES; M. PAULINO ZUNINI

Synthesis of possible inhibitors of the trypanothione reductase trypanocidal activity , 1992

*Evento:* Nacional , I Jornada de pesquisa da AUGM , Santa Maria , 1992

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* inhibitors; trypanothione reductase

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; M. HANSZ; N. HIKICHI; G. TABARES; M.N. FADEL; L. CADENAZZI; A.O.M STTOPPANI

Relación estructura actividad de alfa-lapachona y o-naftoquinonas relacionadas , 1991

*Evento:* Regional , Congreso Latinoamericano de Parasitología. I Congreso Uruguayo de Parasitología , Buenos Aires , 1991

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* alfa-lapachona; o-naftoquinonas; QSAR

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI

Propiedades dependientes de las estructuras electrónicas de los nitrofuranos y su correlación con las actividades biológicas , 1991

*Evento:* Local , II Seminario Taller del Programa de Biología Parasitaria , 1991

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* nitrofuranos; QSAR

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI

Modelado molecular de flavoproteínas relacionadas con el metabolismo del Trypanosoma y huéspedes mamíferos: Glutathione Reductasa, Lipoamida Deshidrogenasa y Tripanotiona Reductasa , 1991

*Evento:* Local , II Seminario Taller del Programa de Biología Parasitaria , 1991

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* glutathione reductase; trypanothione reductase; lipoamide deshydrogenase

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. CIVILA; R. SALVATELLA; R. MANCEBO; R. ROSA; Y. BADMAJIAN; G. MENDARO; M. FERNANDEZ; H. CERECETTO; S. ONETTO; M. PAULINO ZUNINI; A.O.M STTOPPANI

Accion de nitrofuranos de síntesis sobre modelo murino de infección por T. cruzi , 1991

*Evento:* Local , II Seminario Taller del Programa de Biología Parasitaria , Montevideo , 1991

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* nitrofuranos; Trypanosoma cruzi; Modelo Murino

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

E. HORJALES; F. STAMATO; M. PAULINO ZUNINI

Comparacao dos sitios activos e relacao entre os idstintos mecanismos de acao das enzimas tripanotiona reductase, gluationa reductase e lipamida desidrogenase , 1991

*Evento:* Nacional , 14a Reuniao Anual da Sociedade Brasileira de Química , Caxambú - Brasil , 1991

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* glutathione reductase; trypanothione reductase; lipoamide deshydrogenase

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

M. HANSZ; N. HIKICHI; M. PAULINO ZUNINI; A.O.M STOPPANI

Modelado Molecular de Nitrofuranos empleando métodos mecánico moleculares y químico-cuánticos. Comparación con datos cristalográficos , 1991

*Evento:* Nacional , VI Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 1991

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* nitrofuranos; Mecanica Molecular; Mecanica Cuántica

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

N. HIKICHI; M. HANSZ; M. PAULINO ZUNINI

Gráficos moleculares: Aplicación al Estudio Comparativo de Flavoproteínas , 1991

*Evento:* Nacional , VI Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias , Maldonado - Piriápolis , 1991

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Graficos Moleculares; Flavoproteinas

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

M. PAULINO ZUNINI; M. HANSZ; N. HIKICHI; A.O.M STOPPANI

Electronic properties and free radical production by nitrofurans compounds , 1991

*Evento:* Internacional , International Symposium of Active Oxygen Species and Human Health , Buenos Aires , 1991

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* nitrofurans; free radicals; electronic properties

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

#### Resumen

E. HORJALES; F. STAMATO; B. OLIVA; M. PAULINO ZUNINI; O. NILSSON; M.J. AMBROSSIO; O. TAPIA

Trypanothione Reductase - NADPH complex: Model building and docking studies of nitrofurans inhibitors , 1991

*Evento:* Nacional , VI Simposio Brasileiro de Química Teórica , Caxambú - Brasil , 1991

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* trypanothione reductase; docking; nitrofurans

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. HORJALES; B. OLIVA; F. STAMATO; M. PAULINO ZUNINI; O. TAPIA

A Computer Modelling Study of the Interactions between NADPH and the Flavoenzymes Glutathione-Reductase and Trypanothione Reductase , 1991

*Evento:* Nacional , VI Simposio Brasileiro de Química Teórica , Caxambú - Brasil , 1991

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* NADPH; glutathione reductase; trypanothione reductase

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI

Comparación de datos cristalográficos con la estructura obtenida utilizando diversos campos de fuerza para el Glutati6n (GSH) , 1990

*Evento:* Internacional , XIX Congreso Latinoamericano de Química , Buenos Aires , 1990

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Glutathione; campos de fuerza

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. DUBIN; S.H. FERNÁNDEZ-VILLAMIL ; M. PAULINO ZUNINI; A.O.M STTOPPANI

Inhibici6n por nitrofuranos de la lipoperoxidaci6n microsomal hepática y reacciones catalizadas por el citocromo P-450 , 1990

*Evento:* Internacional , Congreso Latinoamericano de Farmacología , Montevideo , 1990

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* lipoperoxidaci6n microsomal hepática; nitrofuranos

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

Resumen

H. CERECETTO; M. GONZÁLES; M. HANSZ; N. HIKICHI; S. ONETTO; F. ZINOLA; M. PAULINO ZUNINI

Potencialidad t6xica del Nifurtimox y análogos, su relaci6n con el potencial formal del par R-NO2- R-NO2 y densidad ekectrónica en el grupo nitro , 1990

*Evento:* Internacional , Congreso Argentino de Protozoología y Reuni6n sobre Enfermedad de Chagas , Buenos Aire , 1990

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* nifurtimox; potencial formal

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

*Medio de divulgaci6n:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; M. HANSZ; N. HIKICHI; A.O.M STTOPPANI

Generaci6n de Radicales Aniones: Correlaciones Estructura-Actividad para Nitrofuranos , 1990

*Evento:* Regional , XIX Congreso Latinoamericano de Química , Buenos Aires , 1990

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* nitrofuranos; QSAR

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

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI; M. HANSZ

Inhibición de Glutathión Reductasa: Correlación Estructura-Actividad para 5-Nitrofuranos , 1990

*Evento:* Regional , XIX Congreso Latinoamericano de Química , Buenos Aires , 1990

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Glutation Reductasa; QSAR; nitrofuranos

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. CIVILA; R. SALVATELLA; R. MANCEBO; R. SOSA; Y. BADMAJIAN; G. MENDARO; M. FERNANDEZ; H. CERECETTO; S. ONETTO; M. PAULINO ZUNINI; A.O.M STTOPPANI

Accion de Nitrouranos de Síntesis sobre Modelo Murino de Infección por Trypanosoma cruzi , 1990

*Evento:* Regional , Congreso Argentino de Protozoología y Reunión sobre Enfermedad de Chagas , Buenos Aires , 1990

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Modelo Murino; nitrofuranos; Trypanosoma cruzi

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI; M. HANSZ

Comparison of Gluathione and Trypanothione Reductase-Ligand interactions: X-Ray Crystallography and Molecular Mechanics on Struture-Activity Analysis. , 1990

*Evento:* Internacional , International Symposium on Crystallography and Molecular Biology , Sao Paulo , 1990

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* glutathione reductase; trypanothione reductase

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; E. HORJALES

Docking Studies on inhibition of Glutathione Reductase by Nitrofurans: its Relation with the ACtive Site of Trypanothione Reductase , 1990

*Evento:* Internacional , International Symposium on Crystallography and Molecular Biology , Sao Paulo , 1990

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* docking; glutathione reductase; nitrofurans

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

E. HORJALES; M. PAULINO ZUNINI

Binding Site of Nitrofurans Derivatives into the Active Site of Gluathione and Trypanothione Reductase Modelled using Docking Methods and Molecular Mechanics , 1990

*Evento:* Internacional , International Symposium on Crystallography and Molecular Biology , 1990

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Binding Site; nitrofurans; glutathione reductase; trypanothione reductase

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformatica Estructural, Quimica Médica

*Medio de divulgación:* Papel;

Sistema Nacional de Investigadores

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI

Comparación de datos cristalográficos con la estructura obtenida utilizando diversos campos de fuerza para el Glutación (GSH) , 1990

*Evento:* Internacional , XIX Congreso Latinoamericano de Química , Buenos Aires , 1990

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* campos de fuerza; Glutation

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; B. MESTER; G SERRA; RM CLARAMUNT; AOM STOPPANI

Estudio de la Relación de Estructura-Actividad para derivados del 5-nitrofurano usando técnicas cromatográficas y computacionales. II congreso Latinoamericano de Cromatografía. Buenos Aires. Octubre 1988. , 1990

*Evento:* Internacional

*Palabras clave:* HPLC; 5-nitrofurano

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

Completo

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI; M. HANSZ; O.N. VENTURA

Comparación de datos Cristalográficos para la Estructura del Glutación con Cálculos Mecánico Moleculares , 1989

*Evento:* Internacional , XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina , La Plata Argentina , 1989

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática Estructural, Extracción, análisis e identificación de carotenoides

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

N. HIKICHI; H. CERECETTO; S. ONETTO; B. MESTER; M. PAULINO ZUNINI

Estudio de la Relación Estructura Actividad para derivados del 5-nitrofurano utilizando técnicas cromatográficas y computacionales. Parte II. , 1989

*Evento:* Internacional , IV Reunión Latinoamericana de Ciencias Farmacéuticas , Buenos Aires , 1989

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* nitrofuranos; in silico; HPLC; chaga's disease

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

*Medio de divulgación:* Papel;

Resumen

M. PAULINO ZUNINI; N. HIKICHI; M. HANSZ; F. STAMATO

Modelado teórico de la estructura del Glutación oxidado generado por Mecánica Molecular , 1989

*Evento:* Internacional , V Simposio Brasileiro de Química Teórica , Caxambú - Brasil , 1989

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* Glutation; Mecánica Molecular

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

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

M. PAULINO ZUNINI; P RAIMONDA; S LONATI

Estudio teórico de la correlación estructura-actividad para éteres halogenados anestésicos o convulsivantes , 1987

*Evento:* Internacional , 4º Congreso Argentino de Farmacia y Bioquímica Industrial , Buenos Aires , 1987

*Palabras clave:* anestésicos

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

## Resumen

M. PAULINO ZUNINI

Theoretical studies of the molecular complexes between hidroxamics and boric acids. , 1987

*Evento:* Internacional , IV Simposio Brasileiro de Química Teórica , Caxambú. Minas Gerais. Brasil , 1987

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* hydroxamic acids

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

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

M. PAULINO ZUNINI; J RAMA; A IGLESIAS; ON VENTURA

Estudio teórico de la correlación estructura-actividad para hidrocarburos halogenados con actividad anestésica , 1986

*Evento:* Internacional , III Reunión Latinoamericana de Ciencias Farmacéuticas , Montevideo , 1986

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* anestésicos

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

## Resumen

M. PAULINO ZUNINI; A IGLESIAS; RM SOSA

Estructura electronica de acidos hidroxamicos y algunos derivados , 1983

*Evento:* Internacional , Tercer Congreso Argentino de Físico Química , La Plata Argentina , 1983

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

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

*Medio de divulgación:* Papel;

## Resumen

M. PAULINO ZUNINI; A IGLESIAS; ON VENTURA

Estudios sobre la potencia anestésica de haloetanos I. Investigación teórica de relaciones estructurales , 1983

*Evento:* Internacional , Tercer Congreso Argentino de FísicoQuímica , La Plata, Argentina , 1983

*Anales/Proceedings:* Arbitrado: SI

*Palabras clave:* haloetanos

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

## Resumen

M. PAULINO ZUNINI; RM SOSA

Estudio Mecánico Cuántico de las conformaciones y espectros electrónicos de algunos ácidos hidroxámicos y sus iones , 1979

*Evento:* Internacional , Jornadas Química. Cincuentenario de la Facultad de Química , Montevideo , 1979

*Palabras clave:* ácidos hidroxámicos

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

*Medio de divulgación:* Papel;

## Texto en periódicos

Revista  
M. PAULINO ZUNINI  
PROVITIS: UN CONSORCIO ENTRE LA CIENCIA Y LA PRODUCCIÓN , VOCES TECNOLÓGICAS , v: , p: , 2015  
*Palabras clave:* propóleos; orujos de uvas  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de Fitonutrientes  
*Lugar de publicación:* MONTEVIDEO;

Revista  
M. PAULINO ZUNINI  
Científicos Uruguayos contra el Mal de Chagas. Reportaje a cargo de Nelson Días. , Caras y Caretas , v: , p: , 2005  
*Palabras clave:* chagas  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química  
*Medio de divulgación:* Papel; *Lugar de publicación:* Montevideo;

Revista  
M. PAULINO ZUNINI  
Propiedades fitonutrientes y fitoterapéuticas de hierbas medicinales y productos naturales , Caras y Caretas , v: , p: , 2004  
*Palabras clave:* fitonutrientes; fenoles  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química  
*Medio de divulgación:* Papel; *Lugar de publicación:* Montevideo;

Revista  
M. PAULINO ZUNINI  
Mal de Chagas, Mal de Muchos. Nuevos Fármacos para Combatirlo, , Cuadernos de Marcha. Tercera Epoca, Año VIII , v: 76 , p: 1010 , 1982  
*Palabras clave:* Mal de Chagas  
*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Medicina Química  
*Medio de divulgación:* Papel; *Lugar de publicación:* Montevideo;

## Evaluaciones

Evaluación de Proyectos  
2014 / 2014  
*Institución financiadora:* CSIC  
*Cantidad:* Menos de 5  
CSIC

Evaluación de Proyectos  
2012 / 2012  
*Institución financiadora:* Agencia Nacional de Investigacion e Innovación - Llamado Fondos Clemente Estable  
*Cantidad:* Menos de 5  
Agencia Nacional de Investigacion e Innovación - Llamado Fondos Clemente Estable , Uruguay

Evaluación de Proyectos  
2009 / 2009  
*Institución financiadora:* FOCANLIS  
*Cantidad:* Menos de 5  
FOCANLIS , Argentina

Evaluación de Proyectos  
2005 / 2005  
*Institución financiadora:* IFS  
*Cantidad:* Menos de 5  
IFS , Suecia



## Evaluación de Eventos

2010

*Nombre:* Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias. Maldonado, Piriápolis. Mayo 2010., Uruguay

## Evaluación de Publicaciones

2013 / 2013

*Nombre:* Current Topics in Medicinal Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5

## Evaluación de Publicaciones

2011 / 2011

*Nombre:* Journal of Biomedicine and Biotechnology,

*Cantidad:* Menos de 5

## Evaluación de Publicaciones

2008 / 2014

*Nombre:* Journal of Chilean Chemistry Society,

*Cantidad:* De 5 a 20

## Evaluación de Publicaciones

2005 / 2011

*Nombre:* Journal of Molecular Modeling,

*Cantidad:* De 5 a 20

## Evaluación de Publicaciones

2003 / 2003

*Nombre:* Journal of Molecular Structure,

*Cantidad:* Menos de 5

## Formación de RRHH

### Tutorías concluidas

#### Posgrado

##### Tesis de maestría

Dinámica Molecular en GPU aplicada a complejos membrana-proteína-ligando , 2014

*Tipo de orientación:* Cotutor en pie de igualdad

*Nombre del orientado:* Yamandú Gonzáles

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Bioinformática (UDELAR-PEDECIBA)

*Palabras clave:* Dinámica Molecular Graphic Processor Unit

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

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

##### Tesis de maestría

Identificación de los blancos de acción molecular de flavonoides mediante tamizaje virtual en librerías de estructuras tridimensionales de proteínas , 2013

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Diego Carvalho

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Bioinformática

*Palabras clave:* flavonoides; blancos de acción ; tamizaje virtual

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, análisis conformacional

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

Tesis de doctorado

Modelado y estudio de complejos de Ciclosporina A y compuestos relacionados con una ciclofilina de Trypanosoma cruzi , 2013

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Roberto Carraro

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Palabras clave:* bioinformática estructural

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

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

Tesis de doctorado

Relación Estructura-Actividad de Polifenoles: Desarrollo y Aplicación de Técnicas de Farmacología Molecular y Estudios de Unión a Blancos Involucrados en los Mecanismos de Acción , 2011

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Elena Alvareda Migliaro

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química

*Palabras clave:* oxidoreductasas; quinonas; fenoles

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

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

Tesis de doctorado

Diseño Racional y caracterización farmacológica de nuevos agonistas nicotínicos derivados de la cistina , 2010

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Juan Andrés Abin Carriquiry

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química

*Palabras clave:* agonistas nicotínicos cistina

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

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

***Tesis de doctorado***

***“Interacciones moleculares de ligandos a las flavoenzimas glutatión reductasa, tripanotióna reductasa y lipoamida deshidrogenasa , 2005***

*Tipo de orientación:* ***Tutor único o principal***

*Nombre del orientado:* ***Federico Iribarne***

***Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)***

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

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

Tesis de doctorado

Estudio de las interacciones del represor CreA con el ADN en Aspergillus nidulans , 2000

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Patricia Esperón

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Palabras clave:* Aspergillus nidulans

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

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

### Tesis de maestría

Modelado molecular y estudios de mecanismos de acción de proteínas asociadas a enfermedades parasitarias". Defensa de Tesis , 1999

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Mauricio Vega

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

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

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

### Tesis de maestría

Bases Moleculares de la reactividad de flavoenzimas hacia drogas y ligando , 1998

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Federico Iribarne

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

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

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

## Grado

Tesis/Monografía de grado

Carotenoides en hojas de cítricos: caracterización in vitro , 2013

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Valentina Velazco

Universidad ORT Uruguay - Facultad de Ingeniería , Uruguay , Licenciatura en Biotecnología

Palabras clave: carotenoides, bioinformática

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

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

Tesis/Monografía de grado

Desarrollo y caracterización de antioxidantes encapsulados a partir de orujos de uva , 2012

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Marcela Pearce

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Ingeniería de Alimentos

Palabras clave: antioxidantes, orujos de uva tannat, fenoles

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Desarrollo de extractos antioxidantes a partir de desechos industriales

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

Tesis/Monografía de grado

Desarrollo y caracterización de antioxidantes encapsulados a partir de orujos de uva , 2012

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Antonella Roascio

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Ingeniería de Alimentos

Palabras clave: antioxidantes, orujos de uva tannat, liposomado

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Liposomas de extractos antioxidantes encapsulados a partir de desechos industriales

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

Tesis/Monografía de grado

ANÁLISIS IN VITRO E IN SILICO DE LA ACTIVIDAD INHIBITORIA SOBRE XANTINA OXIDASA, Y ANÁLISIS DE LA CAPACIDAD CAPTADORA DE RADICALES LIBRES DE EXTRACTOS ETANÓLICOS DE PROPÓLEOS PROVENIENTES DE URUGUAY , 2011

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Yisel Rodríguez

Univ Católica Del Norte , Chile , Tesis de Grado para obtener el Título de Químico Farmacéutico

Palabras clave: antioxidantes, fenoles

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Papel, País/Idioma: Chile/Español

*Información adicional:* Esta tutoría se realizó durante mi estadía sabática en la UCN Chile y defendida por la estudiante luego de mi regreso, en el 2011.

Tesis/Monografía de grado

Estudio In Silico de los efectos de lactonas sesquiterpénicas en el Factor Nuclear kappa B (NF- $\kappa$ B) , 2009

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Luis Alejandro Castro

Univ Católica Del Norte , Chile , Tesis de Grado para obtener el Título de Químico Farmacéutico

*Palabras clave:* lactonas sesquiterpénicas antitumorales

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

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

Tesis/Monografía de grado

Perfil polifenólico de extractos de propóleos uruguayos por HPLC y estudios de anclaje molecular (docking) con xantina oxidasa , 2008

*Nombre del orientado:* Cristhian Rojas

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Bachiller en Química

*Palabras clave:* flavonoides, antioxidantes, docking

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

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

Tesis/Monografía de grado

Estructura De Polifenoles Presentes En Marcela Y Propóleos Y Su Relación Con Biomoléculas Involucradas En El Estrés Oxidativo , 2006

*Nombre del orientado:* Manuel Cedrés

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Química

*Palabras clave:* flavonoides, antioxidantes, QSAR

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

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

Tesis/Monografía de grado

Estructura de Polifenoles presentes en Productos Naturales y su relación con Biomoléculas involucradas en el stress oxidativo , 2006

*Nombre del orientado:* Loreto Calderón Cárdenas

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Bachiller en Química

*Palabras clave:* flavonoides, productos naturales, QSAR, docking

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

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

## Otras

Iniciación a la investigación

Desarrollo y caracterización de un producto antiinflamatorio en base a liposomas de orujo de uvas , 2013

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Pablo Miranda Fierro

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* orujos de uvas, antioxidantes, nanotecnología

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de extractos antioxidantes encapsulados a partir de desechos industriales

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

*Información adicional:* La orientación del estudiante se está haciendo con la co-tutoría de la Dra Helena Pardo del centro NANOMAT del Polo Tecnológico de la Facultad de Química

## Tutorías en marcha

### Posgrado

#### Tesis de maestría

Caracterización genómica y proteómica de dioxigenasas responsables del clivaje de carotenoides de especies de citrus , 2016

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Jorge Cantero

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Bioinformática

*Palabras clave:* citrus; oxidasas de carotenoides

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Postgrados en Bioinformática

*País/Idioma:* Uruguay/Español

#### Tesis de doctorado

Estudio de fenoles con actividad antioxidante y antiinflamatoria y su vinculación con el factor de transcripción NF-κB , 2015

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Emiliana Fariña

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Palabras clave:* NF-κB; propóleos; orujos de uvas

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

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

#### Tesis de maestría

Anclaje Reverso aplicado al descubrimiento de nuevos blancos para el desarrollo de antichagásicos , 2014

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Brenda Vera

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas , Uruguay , Maestría en Bioinformática

*Palabras clave:* Anclaje reverso; o-quinona; Chagas disease

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*País/Idioma:* Uruguay/Español

#### Tesis de maestría

Screening Virtual, Farmacóforo, QSAR, docking y dinámica molecular de análogos de agonistas nicotínicos en modelos de receptores nicotínicos de acetilcolina , 2011

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Gustavo Silva Bueno

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Bioinformática (UDELAR-PEDECIBA)

*Palabras clave:* in silico, nicotínicos

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

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

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

## Grado

Tesis/Monografía de grado

Estudios experimentales y diseño biomolecular de inhibidores de xantina oxidasa , 2007

*Nombre del orientado:* Magdalena Dalmás

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Química

*Palabras clave:* xantina oxidasa

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Docking, Modelado Biomolecular, inhibición enzimática, flavonoides

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

## Otros datos relevantes

### Premios y títulos

2009 Investigador Nivel II del Sistema Nacional de Investigaciones (Nacional) Agencia Nacional de Investigación e Innovación

## Jurado/Integrante de comisiones evaluadoras de trabajos académicos

Tesis

*Candidato:* Laura Inés Lafón Hughes

M. PAULINO ZUNINI

Tesis de Maestría en Ciencias Biológicas, opción Neurociencias , 2003

Tesis (Tesis de Maestría en ciencias biológicas, opción Neurociencias) - Ministerio de Educación y Cultura - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

Tesis

*Candidato:* Mariana Boiani

M. PAULINO ZUNINI

Estudio químico y biológico de derivados de N- Óxidos de benzo[1,2 - d]imidazol y aza análogos , 2003

Tesis (Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

Tesis

*Candidato:* Pablo Denis

M. PAULINO ZUNINI

Estudio cinético y termodinámico de reacciones químicas de interés atmosférico , 2000

Tesis (Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

Tesis

*Candidato:* Diego Benítez

M. PAULINO ZUNINI; GAMBINO D; LABADIE

Cribado molecular y fenotípico de compuestos con potencial efecto farmacológico contra enfermedades causadas por tripanosomátidos , 2017

Tesis (Pro.In.Bio Programa Para la Investigación en Ciencias Médicas) - Institut Pasteur de Montevideo - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

*Palabras clave:* Tripanosomiasis, Leishmaniasis

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

Tesis

*Candidato:* Javier Varela

M. PAULINO ZUNINI

Búsqueda de agentes anti Trypanosoma cruzi en plantas del Uruguay , 2015

Tesis (Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

*Palabras clave:* Trypanosoma cruzi; Plantas del Uruguay

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

Tesis

*Candidato:* Agustín Correa

M. PAULINO ZUNINI; A BUSCHIAZZO; G GONZÁLEZ; P. AGUIAR; L. COITIÑO

Doctorado en Ciencias Biológicas , 2014

Tesis (Doctorado en Ciencias Biológicas) - Facultad de Ciencias - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

*Palabras clave:* cristalografía

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

Tesis

*Candidato:* Matias Machado

M. PAULINO ZUNINI

MODELADO MOLECULAR DE PROCESOS RELACIONADOS A LA TRANSCRIPCIÓN DEL VIRUS VIH-1 , 2012

Tesis (Doctorado en Ciencias Biológicas (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Ciencias - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

Tesis

*Candidato:* Mariana Boiani

M. PAULINO ZUNINI

Generación de modelos de clasificación de actividades antichagásicas y estudio de mecanismos de acción: aplicación de la búsqueda de nuevos fármacos anti - Trypanosoma cruzi , 2007

Tesis (Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

Tesis

*Candidato:* Ana Acevedo

M. PAULINO ZUNINI

Eflujo activo de antibióticos mediaa por el sistema MTRH-MtrC-MtrE en Neisseria gonorrhoeae , 2005

Tesis (Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

Tesis

*Candidato:* Pablo Denis

M. PAULINO ZUNINI

Estudio cinético y termodinámico de reacciones químicas de interés atmosférico , 2004

Tesis (Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

*Candidato:* Santiago Deicas

M. PAULINO ZUNINI; E. BOIDO; A MARTÍN

Estudio de la capacidad ANTIOXIDANTE EN VINOS TINTOS URUGUAYOS , 2015

(Ingeniería de Alimentos) - Facultad de Agronomía - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

*Palabras clave:* vino; antioxidantes

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Alimentos

*Candidato:* Astrid Bradner

M. PAULINO ZUNINI

Modelización estructural de la interacción entre proteína quinasa dependiente de AMPc y la proteína core del virus de Hepatitis C , 2011

(Licenciatura en Bioquímica) - Facultad de Ciencias - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

*Palabras clave:* virus Hepatitis C; proteína quinasa

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

*Candidato:* Marcelo Miraballes Reynoso

M. PAULINO ZUNINI

Influencias de la destilación con vapor en las características fisicoquímicas y sensoriales de extractos acuosos de plantas nativas sudamericanas , 1990

(Ingeniería de Alimentos) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

*Candidato:* Alexandra Castro

M. PAULINO ZUNINI

Análisis de la reactividad intrínseca de nucleobases en secuencias de ADN relevantes frente a la acción de fármacos anticancerígenos (Cisplatino y Mitomicina C) , 1990

(Licenciatura en Bioquímica) - Facultad de Ciencias - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

Tesis/Monografía de grado

*Candidato:* Mauricio Argimón

M. PAULINO ZUNINI

No indica , 2013

Tesis/Monografía de grado () - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

Otros tipos

*Candidato:* Lucia Otero

M. PAULINO ZUNINI

No indica , 2010

Otra participación (Doctorado en Química) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

Otros tipos

*Candidato:* Alicia Merlino

M. PAULINO ZUNINI

No indica , 2007

Otra participación (Doctorado en Química) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

Otros tipos

*Candidato:* Mariana Boiani

M. PAULINO ZUNINI

Generación de modelos de clasificación de actividades antichagásicas y estudio de mecanismos de acción: aplicación de la búsqueda de nuevos fármacos anti - Trypanosoma cruzi , 2006

Otra participación (Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

Otros tipos

*Candidato:* Jorge Gancheff

M. PAULINO ZUNINI

Química en solución acuosa de dioxocomplejos de Re (V) , 2002

Otra participación (Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

## Presentaciones en eventos

Congreso

Study of the geometrical Isomerization of zeaxanthin by chemical and in silico approaches Gutiérrez-Rodríguez FJ1, Cantero, J2 Mapelli-Brahm, P1, Benítez-González AM1, Stinco CM1, Paulino, M2 , Meléndez-Martínez AJ1 , 2017

*Tipo de participación:* Otros, *Carga horaria:* 5

*Referencias adicionales:* Suiza; *Nombre del evento:* ICS Symposium <http://www.icslucerne2017.org/>;

*Palabras clave:* carotenoides; zeaxanthin; análisis conformacional

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

Congreso

An In Silico Study of the Dioxygenases CCD4 family Substrates in Citrus , 2015

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

*Referencias adicionales:* Italia; *Nombre del evento:* CHITEL 2015 Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina; *Nombre de la institución promotora:* Universidad di Torino - Italia

*Palabras clave:* Dioxygenases; citrus; CCDs; carotenoids; docking; molecular dynamics

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática



Congreso

Bioinformatics applied to the study of bioactive compounds in foods , 2015

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 20

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Fitoquímicos en Agroalimentación y Salud; *Nombre de la institución promotora:* CYTED - España

*Palabras clave:* carotenoids; omics; bioinformatics; structural bioinformatics

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

Congreso

Bioinformática estructural aplicada al estudio de compuestos bioactivos contenidos en productos naturales , 2012

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 32

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* PRIMER ENCUENTRO RIOPLATENSE DE BIOLOGÍA XIV JORNADAS ANUALES DE LA SOCIEDAD ARGENTINA DE BIOLOGÍA; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Argentina de Biología

*Palabras clave:* Bioinformática

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, docking

Congreso

BIOINFORMÁTICA ESTRUCTURAL APLICADA AL ESTUDIO DE CAROTENOIDES CONTENIDOS EN PRODUCTOS NATURALES , 2012

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 24

*Referencias adicionales:* España; *Nombre del evento:* Carotenoides como ingredientes de alimentos funcionales", que se celebrará en la Facultad de Farmacia de la Universidad de Sevilla ente los días 10 y 12 de septiembre de 2012.; *Nombre de la institución promotora:* CYTED España

*Palabras clave:* carotenoides, bioinformatica

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, docking

Congreso

In silico studies of Echinococcus granulosus FABPs - fatty acids interactions Adriana Esteves1,\*and Margot Paulino Zunini2,\* , 2011

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 24

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* ENAQUI 2011; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Química - PEDECIBA

*Palabras clave:* Echinococcus granulosus; transportadores de ácidos grasos

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Desarrollo de antioxidantes a partir de productos naturales  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioinformática Estructural

Congreso

"Bioinformatica y Diseño de Drogas". Mesa de Bioinformática. Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias. Maldonado, Piriápolis. Mayo 2010. , 2010

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 24

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Uruguaya de Biociencias

*Palabras clave:* bioinformática estructural

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Congreso

Estudios de fenoles presentes en propóleos , 2007

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Simposio satélite "Apterapia". ; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Veterinaria

*Palabras clave:* propóleos

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

M. Paulino Zunini. Montevideo

Congreso

La enfermedad de Chagas. , 2006

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado,

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* A la puerta de los 100 años del conocimiento de una endemia americana ancestral. Balance y futuro, 1909-2006. Chagas, hacia el Siglo XXI.; *Nombre de la institución promotora:* Instituto Mario Fatała Chabén

*Palabras clave:* Enfermedad de Chagas

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

M. Paulino Zunini. Buenos Aires

Congreso

Estudios QSAR de polifenoles presentes en mieles y propóleos. , 2005

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Primer Congreso de Apicultura del Mercosur; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Apícola Uruguaya

*Palabras clave:* bioinformática estructural

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

Elena Alvareda, Manuel Cedrés Fernández, Lorena Shöderle, Cecilia Matonte, Loreto Calderón, Margot Paulino Zunini, 24-29 junio 2005. Punta del Este, Maldonado, Uruguay.

Congreso

Relaciones Estructura-Actividad para o-naftoquinonas tripanocidas , 2002

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Ciencias

*Palabras clave:* bioinformática estructural

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

E. Alvareda, F. Iribarne, A. García, A.O.M. Stoppani, M. Paulino, 29-30 november 2002, Montevideo-URUGUAY .

Congreso

Estudios de docking y PCA de fenotiazinas en los sitios activos de tripanotiona reductasa y glutatión reductasa, , 2002

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Ciencias

*Palabras clave:* bioinformática estructural

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

F. Iribarne, S. Aguilera, M. Murphy, A. O. M. Stoppani and M. Paulino, november 29-30 2002, Montevideo-URUGUAY

Congreso

Molecular pharmacology studies on anti-trypanosomal active compounds. , 2002

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Química

*Palabras clave:* bioinformática estructural

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

M. Paulino\*, F. Iribarne, A. García Otero, E. Alvareda, E. Cabrera, H. Cerecetto, R. Di Maio, S. Aguilera, M. Murphy, C. Gastellú Montevideo. 1-6 de Setiembre 2002

Congreso

Relaciones Estructura-Actividad y estudio del Mecanismo de Acción de Flavonoides con propiedades reguladoras de la sobrevivencia y muerte celular , 2002

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* XVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina. Montevideo.; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Química

*Palabras clave:* bioinformática estructural

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

Margot Paulino, Laura Lafon, Silvia Sepúlveda-Boza, Sara Aguilera-Morales y Federico Dajas. Montevideo. 1-6 de Setiembre 2002.

Congreso

Estudios de docking de compuestos nitrofuránicos en tripanotiona y glutatión reductasas: un análisis grafico. , 2002

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* XVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina.; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Química

*Palabras clave:* bioinformática estructural

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

Federico Iribarne, Ana García Otero, Hugo Cerecetto, Sara Aguilera, Miguel Murphy y Margot Paulino. Montevideo. 1-6 de Setiembre 2002.

Congreso

Estudios de anclaje de compuestos orgánicos adaptables a los sitios de la Tripanotona y Glutatión Reductasa, , 2002

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Uruguaya de biociencias

*Palabras clave:* bioinformática estructural

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

Federico Iribarne, Ana García Otero, Hugo Cerecetto, Mercedes González, Sara Aguilera, Miguel Murphy, Margot Paulino, 10-12 mayo 2002, Maldonado

Congreso

Química Computacional aplicada al estudio de pequeñas moléculas , 1997

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado,

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* Workshop sobre Modelado Molecular. Química Computacional aplicada al estudio de pequeñas moléculas; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Brasileira de Cristalografía

M. Paulino Zunini

Congreso

Diseño de Antichagásicos , 1996

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Conference Summing up 10 years of Bilateral Research Cooperation. ; *Nombre de la institución promotora:* SAREC

M. Paulino Zunini

Seminario

New targets for old drugs: synthesis, in vitro and in silico strategies applied to the discovering of new targets of potent specific tripanosomicidal o-naphtoquinones , 2014

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 30

*Referencias adicionales:* Italia; *Nombre del evento:* Department of Sciences, Roma Tre University Seminars; *Nombre de la institución promotora:* Department of Sciences, Roma Tre University

*Palabras clave:* reverse virtual screening; Chagas disease; o-quinones

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Medicina Química

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

Seminario

Drug design methods available in the Structural Bioinformatic Center - DETEMA - Facultad de Química - UdelaR , 2012

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 8

*Referencias adicionales:* Italia; *Nombre del evento:* Meeting with graduate students of Roma 3 University; *Nombre de la institución promotora:* Roma 3 University

*Palabras clave:* drug design, bioinformatics

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural, docking

Seminario

3.1.44 M. Paulino Zunini. "Estrategias que colaboran en el aumento del valor agregado de los productos naturales". Conferencista Invitada. Seminario sobre Hierbas Aromáticas, Medicinales y fitofármacos. Dirección de Programación Comercial. Ministerio de RREE. Montevideo, Uruguay, 2004. , 2004

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 30

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 3.1.44 Seminario sobre Hierbas Aromáticas, Medicinales y fitofármacos. Dirección de Programación Comercial. Ministerio de RREE.;

Seminario

Docking and Molecular Dynamics studies at trypanothione reductase and glutathione reductase binding sites , 2001

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado,

*Referencias adicionales:* Canadá; *Nombre del evento:* Seminario; *Nombre de la institución promotora:* Department of Chemistry and Biochemistry, Laurentian University

M. Paulino Zunini

Seminario

Modelado Biomolecular de proteínas. Aplicaciones al diseño de inhibidores enzimáticos y de proteínas que unen ADN , 1999

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado,

*Referencias adicionales:* España; *Nombre del evento:* Seminario; *Nombre de la institución promotora:* Univ. de Granada.España. Instituto de Biotecnología Lopez Neira

M. Paulino Zunini

#### Simposio

DEVELOPMENT OF NEW ANTICHAGASIC DRUGS: REVERSE VIRTUAL SCREENING AND MOLECULAR DYNAMICS OF ARILOXY-QUINONES Brenda Vera, Fabio Politicelli, Andrea Cavalli and Margot Paulino , 2017

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 30

*Referencias adicionales:* Suiza; *Nombre del evento:* Structural Based Drug Design 2017;

*Palabras clave:* quinonas; chagas; Anclaje reverso

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

#### Simposio

Study of polyphenols with antioxidant and anti-inflammatory activity and their correlation with Nuclear Factor Kappa B Paulino, M.a Fariña, E.a, Daghero, H.b, Bollati-Fogolín, M.b, Cantero, Jc,a, Mascayano, C.d , Vega-Tejido, M.a Olea, C.e, Moncada, M.e , 2017

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 30

*Referencias adicionales:* Suiza; *Nombre del evento:* Structural Based Drug Design 2017;

*Palabras clave:* polifenoles; NFK-B; antiinflamatorios

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

#### Simposio

"Bioinformatics in Ligand-Based and Structure-Based Drug Design", Theoretical and Practical Course and Workshop. February 22th - March 5th, 2010. , 2010

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Computational Modelling and Simulations of Biological Systems; *Nombre de la institución promotora:* Institut Pasteur de Montevideo, Montevideo, Uruguay

*Palabras clave:* Biomolecular Systems; Drug Design

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

#### Simposio

In silico characterization of cytosine analogues into nicotinic Acetylcholine Receptors 3D Models. Juan Andrés Abin-Carrquiry, Margot Paulino Zunini, Bruce K. Cassels, Federico Dajas. , 2009

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 32

*Referencias adicionales:* Chile; *Nombre del evento:* Workshop on Molecular Simulation of Bio and Nano Particles; *Nombre de la institución promotora:* Centro de Bioinformática y Simulación Molecular de la Universidad de Talca

*Palabras clave:* in silico; nanopartículas; nicotínicos

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / desarrollo de nuevas drogas antiparkinsonianas

#### Simposio

3.1.36 M. Paulino Zunini. Structure Activity Relationships of Polyphenols in Natural Products. IIBCE. Montevideo. Uruguay. Conferencista Invitado. 2006 , 2006

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 20

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 4º AFFASA Simposium. ; *Nombre de la institución promotora:* INSTITUTO DE INVESTIGACIONES BIOLÓGICAS CLEMENTE ESTABLE

#### Simposio

Consensus statement: session 9 . Discovery Research and New Therapeutic tools , 2005

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado,

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* SCIENTIFIC WORKING GROUP ON CHAGAS DISEASE ; *Nombre de la institución promotora:* TDR, WHO/PAHO, CDIA

L Flohe, R. Radi, M. Paulino, SCIENTIFIC WORKING GROUP ON CHAGAS DISEASE . Buenos Aires, 17-19 Abril 2005.

#### Simposio

3.1.49 Medicinal Chemistry – based approach and target-based drug research for the design and structure optimization of new compounds against Chagas disease , 2003

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 3.1.49 Curso Regional Investigación y desarrollo de fármacos antoprotzoarios. AMSUD-Pasteur. Facultad de Ciencias y de Química- UdelaR. Montevideo. Uruguay. 2003; *Nombre de la institución promotora:* 3.1.49 Facultad de Ciencias y de Química- UdelaR.

#### Simposio

3.1.91 M. Paulino Zunini. Theoretical and experimental pharmacological approach to Chagas disease: specific action of new drugs against flavoenzymes of the parasitic related organisms and the mammalian hosts. Conferencista invitada Sweden-Argentina-Uruguay Symposium. Molecular. Biochemical and Immunological Approaches to parasitic diseases. Noviembre 1994. Montevideo. Uruguay. 1994 , 1994

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 3.1.91 Sweden-Argentina-Uruguay Symposium. Molecular. Biochemical and Immunological Approaches to parasitic diseases.; *Nombre de la institución promotora:* SAREC

## Simposio

3.1.99 M. Paulino Zunini. "Estudio de nuevas drogas contra T. cruzi". . Conferencista invitada. Simposio "Enfermedad de Chagas en el Uruguay". Asociacion Medica del Uruguaya. Montevideo Uruguay. 1993 , 1993

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 20

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Simposio de la Asociación Médica Uruguaya; *Nombre de la institución promotora:* Asociación Médica Uruguaya

## Encuentro

Structural Bioinformatics applied to the Carotenoids research , 2014

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Costa Rica; *Nombre del evento:* IBERCAROT 2014; *Nombre de la institución promotora:* CYTED - Spain

*Palabras clave:* carotenoids; structural bioinformatics

*Areas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

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

Medicina Química

## Encuentro

Presentación de resultados del proyecto CSIC-SP al sector Apícola uruguayo , 2008

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Conferencia; *Nombre de la institución promotora:* Fundación Zonamérica

*Palabras clave:* productos naturales; propóleos

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

## Encuentro

Flavonoides con propiedades antioxidantes extraídos de propóleos y marcela , 2005

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Encuentro Regional de Ciencia, Tecnología y Sociedad, de Biotecnología de Productos/Recursos Naturales.; *Nombre de la institución promotora:* Ciencia Tecnología y Sociedad

M. Paulino Zunini, Montevideo

## Encuentro

3.1.38 M Paulino Zunini. Medicina Química de Antioxidantes: Flavonoides con propiedades antioxidantes extraídos de propóleos y marcela. Conferencista invitado Uruguay; Encuentro Regional de Ciencia, Tecnología y Sociedad - Biotecnología de Productos/Recursos Naturales; Ciencia Tecnología y Sociedad . Montevideo. 2005 , 2005

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 40

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 3.1.38 Encuentro Regional de Ciencia, Tecnología y Sociedad - Biotecnología de Productos/Recursos Naturales; Ciencia Tecnología y Sociedad ;

## Encuentro

Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace , 2004

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Encuentro de evaluación de Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace; *Nombre de la institución promotora:* NASA USA - Facultad de Química /UdelaR

M. Paulino Zunini, Montevideo

## Encuentro

3.1.48 Caracterización Estructural de Macromoléculas Biológicas de interés en la formulación de droga antiparasitarias , 2004

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

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Reunión de coordinación CYTED;

## Encuentro

Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace , 2003

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado,

*Referencias adicionales:* Estados Unidos; *Nombre del evento:* Encuentro de evaluación de Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace; *Nombre de la institución promotora:* NASA USA - Universidad de Alabama / Birmingham

M. Paulino Zunini

## Encuentro

Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace , 2002

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado,

*Referencias adicionales:* Costa Rica; *Nombre del evento:* Encuentro de evaluación de Informe anuales de avances de las fases I y II del proyecto de investigación ChagaSpace; *Nombre de la institución promotora:* NASA USA - EARTH Costa Rica

M. Paulino Zunini

## Encuentro

3.1.68 M. Paulino Zunini. "Cuatro modelos de biomoléculas resueltos por Química Computacional: Tripanotona reductasa y Partícula nucleosomal de T. cruzi, EgDF1 y Malato deshidrogenasa de E granulosus". Conferencista invitada. Encuentro de Investigadores PEDECIBA Química. Montevideo, Uruguay. 1998 , 1998

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 30

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Encuentro de Investigadores PEDECIBA Química. Montevideo; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA Química

## Indicadores de producción

<i>Producción bibliográfica</i>	<b>189</b>
<i>Artículos publicados en revistas científicas</i>	<b>58</b>
Completo (Arbitrada)	57
Completo (No Arbitrada)	1
<i>Artículos aceptados para publicación en revistas científicas</i>	<b>1</b>
Completo (Arbitrada)	1
<i>Trabajos en eventos</i>	<b>118</b>
Completo (Arbitrada)	5
Resumen (Arbitrada)	101
Resumen (No Arbitrada)	10
Resumen expandido (Arbitrada)	1
Resumen expandido (No Arbitrada)	1
<i>Libros y capítulos de libros publicados</i>	<b>5</b>
Capítulo de libro publicado	4
Libro compilado	1
<i>Textos en periódicos</i>	<b>4</b>
Revista	4
<i>Documentos de trabajo</i>	<b>3</b>
Completo	3
<i>Producción técnica</i>	<b>0</b>
<i>Productos tecnológicos</i>	<b>0</b>
<i>Procesos o técnicas</i>	<b>0</b>
<i>Trabajos técnicos</i>	<b>0</b>
<i>Otros tipos</i>	<b>0</b>
<i>Evaluaciones</i>	<b>10</b>
Evaluación de Proyectos	4
Evaluación de Eventos	1
Evaluación de Publicaciones	5
<i>Formación de RRHH</i>	<b>23</b>
<i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</i>	<b>18</b>
Tesis de maestría	4
Tesis de doctorado	5
Tesis/Monografía de grado	8
Iniciación a la investigación	1
<i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha</i>	<b>5</b>
Tesis de maestría	3
Tesis de doctorado	1
Tesis/Monografía de grado	1

**Sistema Nacional de Investigadores**

**Sistema Nacional de Investigadores**