



# Curriculum Vitae

## Alicia Beatriz MERLINO MELLOGNIO



Actualizado: 05/06/2017

Publicado: 20/07/2017

**Sistema Nacional de Investigadores**

Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas

Categorización actual: Nivel I

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

## Datos generales

### Información de contacto

E-mail: amerlino@fcien.edu.uy

Teléfono: 2 525 2186

Dirección: Iguá 4225 CP 11400

### Institución principal

Laboratorio de Química Teórica y Computacional / Facultad de Ciencias - UDeLaR / Universidad de la República / Uruguay

### Dirección institucional

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

Teléfono: (+2) 2525-2186

Fax: 2525-0749

E-mail/Web: amerlino@fcien.edu.uy

## Formación

### Formación concluida

#### Formación académica/Titulación

##### Posgrado

2007 - 2010

Doctorado

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

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

Título: Investigación y desarrollo de nuevos fármacos anti-T. cruzi: Inhibidores de cruzipaina derivados del sistema benzofuroxano y 1,3 dióxido de benzimidazol

Tutor/es: Dr. Hugo Cerecetto y Dra. Mercedes González

Obtención del título: 2010

Becario de: Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay

Palabras clave: Inhibidores de cruzipaina

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

##### Grado

2001 - 2005  
 Grado  
 Licenciatura en Bioquímica  
 Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay  
*Título:* Modificaciones estructurales de derivados de di-N-óxido de benzimidazol con actividad anti-T. cruzi  
*Tutor/es:* Dr. Hugo Cerecetto y Dra. Mercedes González  
*Obtención del título:* 2005  
*Palabras clave:* Derivados de di-N-óxido de benzimidazol  
*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Médica

## Formación complementaria

### Cursos corta duración

08 / 2010 - 09 / 2010 "Simulación Molecular usando VMD y NAMD"  
 Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay  
*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Simulación Molecular

02 / 2010 - 03 / 2010 Computational Modelling and Simulation of Biological Systems  
 Institut Pasteur de Montevideo, Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay  
*Palabras clave:* modelado computacional  
*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Bioinformática

12 / 2009 - 12 / 2009 Interações intermoleculares por RMN  
 Universidade Federal do Rio de Janeiro , Brasil

04 / 2009 - 04 / 2009 Estrés oxidativo en patología humana. Estado Actual y Nuevas estrategias  
 Facultad de Medicina - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

07 / 2008 - 11 / 2008 Farmacoterapia I  
 Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

02 / 2008 - 06 / 2008 Farmacología  
 Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

2007 - 2007 Aislamiento de productos naturales bioactivos  
 Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

2007 - 2007 Microscopía de barrido por sondas: métodos y aplicaciones  
 Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

2007 - 2007 Química Farmaceutica 101  
 Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

2007 - 2007 Nuevas metodologías en síntesis orgánica y sus aplicaciones  
 Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

2007 - 2007 Diseño de fármacos  
 Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

12 / 2007 - 12 / 2007 Investigación y Desarrollo de Nuevos Fármacos Para el Tratamiento de la Enfermedad de Chagas  
 Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay  
*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Médica

2006 - 2006 Elucidación Estructural  
 Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

2006 - 2006 Química de los Productos Naturales  
 Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

2006 - 2006 3D QSAR strategies in drug design  
 Universidade de São Paulo , Brasil  
*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Médica

2006 - 2006	Introducción al QSAR y diseño racional de comps. bioactivos Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay
2006 - 2006	Mecanismos en Química Orgánica Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay
2006 - 2006	Laboratorio de Fitoquímica Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay
07 / 2006 - 07 / 2006	Clusters, Molecules, Biomolecules and Materials Universidad de Buenos Aires , Argentina
2005 - 2005	Espectroscopía de Compuestos Orgánicos Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay
2005 - 2005	Nuevas estrategias en el hallazgo de fármacos Facultad de Farmacia y Bioquímica , Argentina
2005 - 2005	Química Heterocíclica Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay
2004 - 2004	Estrategias biomédicas en el diseño de fármacos antitumorales Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay
2003 - 2003	Curso Taller de Química Computacional Facultad de Ciencias - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica
2003 - 2003	Bioinorgánica Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay

#### Otras instancias

2004	Seminarios <i>Nombre del evento:</i> RIA y ELISA en cuantificación hormonal <i>Institución organizadora:</i> Laboratorio de Fisiología y Nutrición, Facultad de Ciencias, UDELAR , Uruguay
2007	Congresos <i>Nombre del evento:</i> XV Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica <i>Institución organizadora:</i> Sociedad Española de Química Terapéutica , España <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Médica
2006	Congresos <i>Nombre del evento:</i> 3rd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry <i>Institución organizadora:</i> Universidad de San Pablo , Brasil <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Médica
2006	Congresos <i>Nombre del evento:</i> 8va Escuela de Invierno Giambiagi: Clusters, Molecules, Biomolecules and Materials <i>Institución organizadora:</i> Facultad de Ciencias Exactas y Naturales , Argentina <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica
2005	Congresos <i>Nombre del evento:</i> XI Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias <i>Institución organizadora:</i> Sociedad Uruguaya de Biociencias , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Médica
2004	Congresos <i>Nombre del evento:</i> 3as Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular <i>Institución organizadora:</i> Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Médica
2006	Encuentros <i>Nombre del evento:</i> XIV Jornadas de Jóvenes Investigadores de la AUGM <i>Institución organizadora:</i> Universidad de Campinas , Brasil

# Construcción institucional

## Idiomas

Español

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

Inglés

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

Portugués

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

## Áreas de actuación

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Médica

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

## Actuación Profesional

### Cargos desempeñados actualmente

Desde: 12/2011  
Profesor Adjunto, (Docente Grado 3 Titular, 40 horas semanales / Dedicación total), Facultad de Ciencias - UDeLaR, Uruguay

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

#### Vínculos con la institución

11/2003 - 07/2004, Vínculo: Ayudante, Docente Grado 1 Interino, (10 horas semanales)

05/2005 - 07/2005, Vínculo: Ayudante, Docente Grado 1 Interino, (25 horas semanales)

07/2005 - 06/2006, Vínculo: Ayudante de Investigación, Docente Grado 1 Interino, (40 horas semanales / Dedicación total)

07/2009 - 12/2011, Vínculo: Profesor Adjunto, Docente Grado 3 Interino, (32 horas semanales)

12/2011 - Actual, Vínculo: *Profesor Adjunto, Docente Grado 3 Titular, (40 horas semanales / Dedicación total)*

#### Actividades

04/2012 - Actual

Líneas de Investigación, Facultad de Ciencias/Instituto de Investigaciones Biológicas Clemente Estab, Laboratorio de Química Teórica y Computacional/Unidad de Biología Celular

Desarrollo de inhibidores de caspasa-3 para el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer, Coordinador o Responsable

08/2009 - Actual

Docencia, Grado

Físicoquímica Moderna, Asistente, Licenciatura en Bioquímica

06/2016 - 06/2016

Docencia, Especialización

Estudio in silico de interacciones fármaco-proteína en el curso internacional de posgrado "Desarrollo de terapias novedosas para la inflamación crónica", Invitado, Curso CABBIO

03/2013 - 05/2013

Docencia, Especialización

Laboratorio de Química Bioorgánica, Invitado, Licenciatura Bioquímica/Ciencias Biológicas

03/2012 - 06/2012

Docencia, Especialización

Curso taller de química teórica y computacional, Asistente, Licenciatura en Bioquímica

03/2012 - 03/2012

Docencia, Especialización

Herramientas bioinformáticas y su aplicación al diseño racional de fármacos., Responsable, Profundización (UDELAR - PEDECIBA QUIMICA)

11/2011 - 12/2011

Docencia , Especialización

Laboratorio de Química Bioorgánica , Invitado , Licenciatura en Bioquímica/Ciencias Biológicas

03/2010 - 06/2010

Docencia , Especialización

Curso taller de química teórica y computacional , Asistente

09/2010 - 12/2010

Docencia , Pregrado

Laboratorio de Química Bioorgánica , Invitado , Licenciatura Bioquímica/Ciencias Biológicas

03/2004 - 07/2004

Docencia , Pregrado

Curso Taller de Química Computacional , Licenciatura en Bioquímica

10/2003 - 12/2003

Docencia , Pregrado

Fisicoquímica II , Licenciatura en Bioquímica

12/2016 - 12/2016

Docencia , Doctorado

Predicción y análisis in silico de la estructura e interacciones de proteínas en diálogo con la experimentación , Responsable , Curso posgrado PEDECIBA QUIMICA

07/2004 - 07/2004

Otra actividad técnico-científica relevante , Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Participación en el dictado del curso de Educación Permanente "Diseño y Visualización asistida por PC de la estructura 3D de moléculas y macromoléculas"

11/2003 - 11/2003

Otra actividad técnico-científica relevante , Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Actividades de soporte al dictado del curso de Educación Permanente de "Química de la Atmósfera y Polución"

04/2003 - 08/2003

Otra actividad técnico-científica relevante , Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Tareas de soporte en el desarrollo del material para el curso de Ciencias Físico-Químicas de 3er año de Educación Secundaria en el marco del convenio con ANEP obtenido por el Laboratorio de Química Teórica y Computacional

09/2016 - Actual

Gestión Académica , Facultad de Ciencias

Clautrista suplente

06/2016 - Actual

Gestión Académica , Facultad de Ciencias , Instituto de Química Biológica

Titular

03/2014 - Actual

Gestión Académica , Facultad de Ciencias , Instituto de Química Biológica

Suplente en la Comisión de Instituto del IQB

03/2011 - Actual

Gestión Académica , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Suplente de Laura Coitiño en la Comisión de Informática

04/2015 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

I+D de inhibidores selectivos de caspasa-3 como potenciales fármacos para el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer , Coordinador o Responsable

02/2011 - Actual

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

Diseño racional y síntesis de inhibidores irreversibles de enzimas de T. cruzi , Coordinador o Responsable

03/2014 - 12/2015

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional/Grupo de Química Medicinal

Inhibición selectiva de Triosafosfato Isomerasa (TIM) como estrategia para el desarrollo de fármacos de uso veterinario contra la garrapata *Rhipicephalus microplus* , Coordinador o Responsable

05/2013 - 05/2015

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Diseño y Síntesis de profármacos con mecanismo de acción dual para el tratamiento de tumores sólidos , Integrante del Equipo

02/2013 - 12/2013

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Estudios teóricos de la interacción de galactósidos sintéticos con las enzimas galectina-1 y concanavalina A , Coordinador o Responsable

12/2011 - 12/2013

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Orgánica

Desarrollo de terapias antineoplásicas sensibilizadoras para células tumorales hipóxicas , Integrante del Equipo

06/2010 - 12/2013

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

Caracterización fisicoquímica de distintos ácidos grasos nitrados y estudios teóricos de su interacción con las enzimas ciclooxigenasas I y II , Integrante del Equipo

03/2011 - 12/2012

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

Modelado de la interacción de complejos de vanadio y platino con la enzima fumarato reductasa de *Leishmania major* y *Trypanosoma cruzi* , Coordinador o Responsable

03/2010 - 06/2011

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

Estudio de la relación estructura-actividad biológica de distintos complejos de Pt(II)/Pd(II) conteniendo agrupamientos 5-nitrofuriltiosemicarbazona , Coordinador o Responsable

02/2010 - 12/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo

“Caracterización in silico de la interacción de una serie de complejos de Renio con seroalbúmina” , Integrante del Equipo

07/2009 - 11/2010

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

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

11/2009 - 05/2010

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

Estudios sobre las propiedades y el mecanismo de acción molecular de fármacos de la familia del Cisplatino y análogos en su acción como agentes anticancerígenos , Integrante del Equipo

07/2005 - 06/2006

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Orgánica

Clinical development of arylethylenylbenzofuroxan derivatives as drugs for Chagas Disease , Integrante del Equipo

05/2005 - 07/2005

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

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

06/2004 - 07/2005

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Orgánica

Investigación y desarrollo de fármacos antichagásicos con un mecanismo de acción dual , Integrante del Equipo

04/2003 - 05/2005

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

Estructura molecular y características espectrales de interruptores moleculares de luz – compuestos de  $[Ru(II)(L)_2(dppz)]^{2+}$  y su posible uso en la detección de alteraciones del ADN , Integrante del Equipo

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

### **Vínculos con la institución**

06/2006 - 12/2007, *Vínculo:* Beca de Maestría PEDECIBA-Química, No docente (40 horas semanales)

12/2007 - 01/2008, *Vínculo:* Beca de Doctorado PEDECIBA-Química, No docente (40 horas semanales)

### **Actividades**

06/2006 - 11/2010

Líneas de Investigación , Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Orgánica

Investigación y desarrollo de nuevos fármacos anti T. Cruzi: Inhibidores de cruzipaina derivados del sistema benzofuroxano y 1,3-dióxido de benzimidazol , Coordinador o Responsable

## **Universidad de Navarra , España**

### **Vínculos con la institución**

02/2006 - 05/2006, *Vínculo:* Pasantía de Investigación, (40 horas semanales)

### **Actividades**

02/2006 - 05/2006

Pasantías , Centro de Investigación en Farmacología Aplicada , Unidad de Investigación y Desarrollo de Medicamentos

Síntesis de derivados de quinoxalinas con potencial actividad antichagásica

## **Consejo Superior de Investigaciones Científicas , Consejo Superior de Investigaciones Científicas , España**

### **Vínculos con la institución**

09/2007 - 10/2007, *Vínculo:* Pasantía de Investigación, (40 horas semanales)

### **Actividades**

09/2007 - 10/2007

Pasantías , Instituto de Química Médica

Docking y análisis del modo de unión de compuestos derivados del sistema benzofuroxano y 1,3-dióxido de benzimidazol con la enzima cruzaina

## **Universidad Nacional de San Martín , Argentina**

### **Vínculos con la institución**

11/2008 - 11/2008, *Vínculo:* Pasantía de Investigación, (40 horas semanales)

### **Actividades**

11/2008 - 11/2008

Pasantías , Instituto de Investigaciones Biotecnológicas , Laboratorio de Bioquímica y Metabolismo Celular

Realización de una pasantía de investigación "Purificación de cruzipaina y evaluación de la capacidad inhibitoria de compuestos híbridos derivados del sistema benzofuroxano y 1,3-dióxido de benzimidazol y una serie de sulfonil dihidropurinas sustituidas "

## **Agencia Nacional de Investigación e Innovación , Agencia Nacional de Investigación e Innovación , Uruguay**

### **Vínculos con la institución**

01/2008 - 06/2009, *Vínculo:* Estudiante de Doctorado, (40 horas semanales)

11/2008 - 11/2008, *Vínculo:* Pasantía de Investigación, (40 horas semanales)

07/2009 - 06/2010, *Vínculo:* Estudiante de Doctorado, (25 horas semanales)

### **Actividades**

03/2013 - 03/2015

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Grupo de Química Medicinal

Diseño y Síntesis de profármacos con mecanismo de acción dual para el tratamiento de tumores sólidos , Otros/Asesor

02/2009 - 02/2011

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Orgánica

Cisteín proteasas de T. cruzi como blanco terapéutico para el tratamiento de la enfermedad de Chagas , Coordinador o Responsable

# Universidade Federal do Rio de Janeiro , Universidade Federal do Rio de Janeiro , Brasil

## Vínculos con la institución

11/2009 - 12/2009, *Vínculo:* Pasantía de Investigación, (40 horas semanales)

05/2010 - 05/2010, *Vínculo:* Pasantía de Investigación, (40 horas semanales)

## Actividades

05/2010 - 05/2010

Pasantías , Nucleo de Investigación de Productos Naturales , Laboratorio Multiusuario de Análisis por RMN  
Estudios de la interacción inhibidor-cruzapaína por Resonancia Magnética Nuclear

11/2009 - 12/2009

Pasantías , Nucleo de Investigación de Productos Naturales , Laboratorio Multiusuario de Análisis por RMN  
Estudios de la interacción inhibidor-cruzapaína por Resonancia Magnética Nuclear

## Universidade do Porto , Portugal

### Vínculos con la institución

02/2012 - 03/2012, *Vínculo:* , (40 horas semanales)

### Actividades

02/2012 - 03/2012

Pasantías , Universidad de Porto , Theoretical and Computational Biochemistry Group  
Dinámica Molecular aplicada a las enzimas COX-1 y COX-2

### Lineas de investigación

*Título:* Desarrollo de inhibidores de caspasa-3 para el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer

*Tipo de participación:* Coordinador o Responsable

*Objetivo:* La enfermedad de Alzheimer (EA) es el desorden neurodegenerativo con mayor prevalencia a nivel mundial para el cual actualmente no existe cura. Una de las principales razones que ha impedido el desarrollo de un tratamiento efectivo para detener o prevenir EA es el desconocimiento de los factores relevantes que causan la enfermedad. La hipótesis clásica formulada hace casi 20 años que sostiene que EA es causada por la acumulación de depósitos del péptido beta amiloide (A $\beta$ ) (placas seniles) y la consiguiente formación de ovillos neurofibrilares formados por agregación de la proteína Tau ha sido reevaluada en los últimos años. Recientemente se ha observado que existe correlación entre la activación local de la enzima caspasa-3 a nivel de espinas dendríticas en modelos murinos de EA y la aparición de los primeros signos de pérdida de memoria en los ratones. El rol fundamental de caspasa-3 en los estadios iniciales de EA ha sido demostrado a partir de experimentos utilizando un inhibidor peptídico específico de la enzima. El uso de inhibidores de caspasas ha mostrado ser efectivo previniendo la apoptosis en ensayos celulares así como en modelos animales de distintas enfermedades donde un aumento descontrolado en la actividad caspasa conduce a situaciones patológicas. Sin embargo, la mayoría de los inhibidores de caspasas descritos hasta el momento son inhibidores peptídicos irreversibles los cuales en general presentan baja selectividad pudiendo en algunos casos inhibir otras proteasas celulares. Si bien en los últimos años se ha hecho un gran esfuerzo en el desarrollo de inhibidores no peptídicos y reversibles de distintas caspasas, incluyendo caspasa-3, en la mayoría de los casos no existen datos comparativos que den cuenta de su selectividad o no hay información disponible sobre la citotoxicidad de los compuestos o su actividad in vivo. Teniendo en cuenta lo mencionado anteriormente, esta línea de investigación plantea un estudio exhaustivo y sistemático utilizando herramientas de screening in silico que permita la identificación de aquellos determinantes estructurales responsables de la actividad/selectividad frente a caspasa-3. Con esto se pretende organizar la información existente sobre inhibidores de caspasa-3 con el objetivo de diseñar nuevos inhibidores más eficaces y selectivos frente a la enzima. Los compuestos diseñados serán evaluados en primera instancia mediante métodos teóricos de docking molecular a fin de predecir la capacidad de inhibir selectivamente a caspasa-3, lo cual a su vez permitirá el rediseño de nuevas entidades químicas. . Aquellos que de acuerdo al modelo resulten activos/selectivos serán sintetizados y evaluados frente a caspasa-3 y otras caspasas a fin de determinar tanto la actividad como la selectividad de los mismos. Los compuestos seleccionados serán evaluados en líneas celulares neuronales a fin de determinar su toxicidad así como el efecto de los mismos en la modulación de procesos apoptóticos exacerbados.

*Equipos:* Paola Hernández(Integrante); María Laura Lavaggi(Integrante); Lucía Minini(Integrante); Florencia Ferraro(Integrante); Saira Cancela(Integrante)

*Palabras clave:* inhibidores de caspasa-3; diseño de fármacos asistido por computadora; enfermedad de Alzheimer

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



*Título:* Investigación y desarrollo de nuevos fármacos anti T. Cruzi: Inhibidores de cruzipaína derivados del sistema benzofuroxano y 1,3-dióxido de benzimidazol

*Tipo de participación:* Coordinador o Responsable

*Objetivo:* Este trabajo se enmarca en mi tesis de posgrado (Facultad de Química, con Beca de posgrado de PEDECIBA-Química). Teniendo en cuenta que las distintas familias de inhibidores de Cruzipaína descritos en la literatura presentan desventajas claras en el momento de aplicarse sobre el parásito entero y considerando que la enzima es una diana interesante para el desarrollo de nuevos fármacos antichagásicos, el proyecto de tesis propone la investigación y desarrollo de nuevos agentes tripanosomicidas híbridos que combinen dos sistemas farmacofóricos, en este caso un farmacóforo responsable de la inhibición de esta enzima (agrupamientos vinilsulfona, tiosemicarbazona, semicarbazona, guanilhidrazona o bisalquilaminoguanidina) y la estructura bioactiva de los líderes desarrollados por nuestro grupo (sistemas benzofuroxanos y 1,3-dióxido de benzimidazol).

*Equipos:* Mercedes González(Integrante); Hugo Cerecetto(Integrante)

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

## Proyectos

2011 - Actual

*Título:* Diseño racional y síntesis de inhibidores irreversibles de enzimas de T. cruzi, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Proyecto colaborativo con el Dr. Hugo Cerecetto y la Dra. Mercedes González del Laboratorio de Química Orgánica, Facultad de Ciencias. Tipo de participación: Responsable del diseño racional de potenciales inhibidores de las enzimas triosafosfato isomerasa (TIM) y cruzipaína de T. cruzi utilizando herramientas teóricas. Durante este período se han realizado estudios de docking de una serie de inhibidores de TIM a fin de explicar a nivel molecular los rasgos estructurales responsables de los datos de inhibición obtenidos experimentalmente. Estos resultados fueron presentados en la XL reunión anual de la SBBq. En el presente año se realizarán estudios de dinámica molecular sobre los complejos TIM-inhibidor con el objetivo de publicar el trabajo en una revista arbitrada.

*Tipo:* Investigación

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

*Equipo:* Mercedes González(Responsable); Hugo Cerecetto(Responsable); Guzmán Álvarez(Integrante); Javier Varela(Integrante); Lucía Minini(Integrante); Jennifer Martínez(Integrante)

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

2015 - Actual

*Título:* I+D de inhibidores selectivos de caspasa-3 como potenciales fármacos para el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable,

*Tipo:* Investigación

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

*Equipo:* Paola Hernández(Responsable); María Laura Lavaggi(Integrante); Lucía Minini(Integrante); Florencia Ferraro(Integrante); Saira Cancela(Integrante); Ileana Corvo(Integrante)

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

2003 - 2005

*Título:* Estructura molecular y características espectrales de interruptores moleculares de luz – compuestos de [Ru(II)(L)<sub>2</sub>(dppz)]<sup>2+</sup> y su posible uso en la detección de alteraciones del ADN, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo,

*Tipo:* Investigación

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

*Equipo:* Pablo Dans(Integrante)

*Financiadores:* Sin financiamiento

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

2005 - 2005

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

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 3(Pregrado), 1(Doctorado)

*Equipo:* Pablo Dans(Integrante); Matias Machado(Integrante); Gustavo Mourglia(Integrante); Laura Coitiño(Responsable)

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

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

2004 - 2005

*Título:* Investigación y desarrollo de fármacos antichagásicos con un mecanismo de acción dual, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo,

*Tipo:* Investigación

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

*Equipo:* Mariana Boiani(Integrante); Mercedes González(Integrante); Hugo Cerecetto(Responsable); Gabriela Aguirre(Integrante); Alejandra Gerpe.(Integrante)

*Financiadores:* Otra institución nacional / Fondo Clemente Estable / Apoyo financiero

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

2005 - 2006

*Título:* Clinical development of arylethenylbenzofuroxan derivatives as drugs for Chagas Disease, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo,

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 3(Especialización), 3(Doctorado)

*Equipo:* Mariana Boiani(Integrante); Williams Porcal(Integrante); Mercedes González(Responsable); Hugo Cerecetto(Responsable); Alejandra Gerpe.(Integrante); Mauricio Cabrera(Integrante); María Laura Lavaggi(Integrante)

*Financiadores:* Institución del exterior / Drugs for Neglected Diseases initiative / Apoyo financiero

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

2009 - 2010

*Título:* Estudios sobre las propiedades y el mecanismo de acción molecular de fármacos de la familia del Cisplatino y análogos en su acción como agentes anticancerígenos, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Durante este período he trabajado en la difusión de parte de los resultados de este proyecto (preparación y presentación de un póster, preparación de un artículo para ser enviado a una revista arbitrada)

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 1(Pregrado),

*Equipo:* Pablo Dans(Integrante); Laura Coitiño(Responsable); Álvaro Pittini(Integrante)

*Financiadores:* Sin financiamiento

*Palabras clave:* complejos de Pt(II)

2009 - 2010

*Título:* Influencia del entorno fisicoquímico sobre la estructura electrónica y reactividad de bases de ADN: hacia el diseño racional de sondas para diagnóstico y fármacos para quimioterapia altamente selectivos de Ru(II), *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Durante este período he trabajado en la optimización en solución a nivel DFT de distintos complejos de Ru (II)

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:*

*Equipo:* Laura Coitiño(Responsable)

*Financiadores:* Sin financiamiento

2010 - 2010

*Título:* "Caracterización in silico de la interacción de una serie de complejos de Renio con seroalbúmina" , *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* en el marco de la colaboración establecida entre la Dra. Fernanda Cerdá del Laboratorio de Biomateriales de Facultad de Ciencias y la Dra. Laura Coitiño. Tipo de participación: Durante este período he realizado estudios de docking de una serie de compuestos de Re(V) con seroalbúmina humana cuyos resultados dieron lugar a la presentación de un póster en un congreso internacional (Ver apartado 3.1). Actualmente, se están realizando estudios análogos con seroalbúmina bovina a fin de comparar los resultados teóricos con datos experimentales.

*Tipo:* Desarrollo

*Alumnos:* 1(Maestría/Magister),

*Equipo:* Laura Coitiño(Responsable); Fernanda Cerdá(Responsable); Jenner Bonanata(Integrante)

*Financiadores:* Sin financiamiento

2009 - 2011

*Título:* Cisteín proteasas de *T. cruzi* como blanco terapéutico para el tratamiento de la enfermedad de Chagas, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* La enfermedad de Chagas, causada por el protozoario *Trypanosoma cruzi*, afecta a unos 20 millones de personas en América Latina, ubicándose a nivel mundial en tercer lugar entre las afecciones parasitarias. Actualmente no existe un tratamiento satisfactorio para esta enfermedad, sin embargo distintas entidades bioquímicas han sido identificadas como potenciales dianas terapéuticas. Entre ellas, la enzima cruzipaína, principal cisteín proteasa de *T. cruzi*, es una enzima clave para el desarrollo y supervivencia del parásito dentro de la célula del huésped, lo que la convierte en un excelente blanco terapéutico. Teniendo en cuenta lo anterior, en el marco de mi tesis de posgrado he trabajado en la investigación y desarrollo de nuevos agentes tripanosomicidas híbridos que combinan dos sistemas farmacofóricos, un farmacóforo responsable de la inhibición de cruzipaína (agrupamientos vinilsulfona, tiosemicarbazona, semicarbazona, guanilhidrazona o trisalquilguanidina) y la estructura bioactiva de los líderes desarrollados por nuestro grupo (sistemas benzofuroxano y 1,3-dióxido de benzimidazol). Con la experiencia acumulada hasta el momento, en el marco del presente proyecto se pretende avanzar en la síntesis, caracterización y evaluación de nuevos compuestos híbridos así como en la modificación estructural de los compuestos

previamente sintetizados a fin de obtener productos que resulten buenos inhibidores de la enzima. La posibilidad de poder realizar lo mencionado anteriormente resulta importante para hacer más dinámica la etapa de evaluación de los potenciales fármacos, lo cual es crucial en la generación del conocimiento científico necesario para retroalimentar el diseño y desarrollo de compuestos que resulten futuros fármacos para esta enfermedad olvidada.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 1(Doctorado)

*Equipo:* Mercedes González(Integrante); Hugo Cerecetto(Integrante); Alicia Merlino(Responsable); Carlos Robello(Integrante); Luzineide W. Tinoco(Integrante)

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

*Palabras clave:* Enfermedad de Chagas; Inhibidores reversibles; Cruzipaína

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

2010 - 2011

*Título:* Estudio de la relación estructura-actividad biológica de distintos complejos de Pt(II)/Pd(II) conteniendo agrupamientos 5-nitrofuriltiosemicarbazona, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Responsable científica en el marco de la colaboración que nuestro grupo mantiene con la Dra. Dinorah Gambino (Cátedra de Química Inorgánica, Facultad de Química). En este período se completaron exitosamente los cálculos DFT/PCM de los ligandos tiosemicarbazona y los distintos complejos de Pt/Pd comenzados en 2010, se realizaron estudios de data mining y docking molecular. Los resultados obtenidos han permitido la publicación en 2011 de un artículo en la revista Eur. J. Med. Chem. Durante este período se inició y completó la caracterización fisicoquímica de una segunda serie de complejos de Pt/Pd relacionados con los anteriores. Actualmente se están analizando los resultados, los cuales se espera den lugar a dos publicaciones adicionales en revistas arbitradas.

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:*

*Equipo:* Laura Coitiño(Integrante); Dinorah Gambino(Responsable); Lucía Otero(Integrante)

*Financiadores:* Sin financiamiento / Cooperación

*Palabras clave:* complejos de Pt(II)/Pd(II)

2011 - 2012

*Título:* Modelado de la interacción de complejos de vanadio y platino con la enzima fumarato reductasa de Leishmania major y Trypanosoma cruzi, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Responsable científica en el marco de la colaboración que nuestro grupo mantiene con la Dra. Dinorah Gambino. Durante este período he realizado el modelado por homología de la enzima fumarato reductasa de L. major debido a la ausencia de estructuras cristalográficas. Dicho modelo se utilizó posteriormente en estudios de docking para predecir el sitio de unión y la capacidad inhibitoria de uno de los complejos de vanadio

*Tipo:* Desarrollo

*Alumnos:* 1(Doctorado)

*Equipo:* Laura Coitiño(Integrante); Dinorah Gambino(Responsable); Marisol Vieites(Integrante)

*Financiadores:* Sin financiamiento

2010 - 2013

*Título:* Caracterización fisicoquímica de distintos ácidos grasos nitrados y estudios teóricos de su interacción con las enzimas ciclooxigenasas I y II, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Proyecto colaborativo con el Dr. Homero Rubbo (Departamento de Bioquímica y Centro de Radicales Libres e Investigación Biomédica, Facultad de Medicina). En este período he estudiado mediante métodos de docking la interacción de distintos derivados nitrados del ácido araquidónico con las enzimas ciclooxigenasas I y II.

*Tipo:* Investigación

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

*Equipo:* Alicia Merlino(Integrante); Homero Rubbo(Responsable); Andrés Trostchansky(Integrante); Stephanie Portillo(Integrante); Lucía Bonilla.(Integrante); Elena Laura Coitiño(Integrante)

*Financiadores:* Sin financiamiento / Cooperación

*Palabras clave:* ácidos grasos nitrados; COX-1 y COX-2; docking molecular

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

2011 - 2013

*Título:* Desarrollo de terapias antineoplásicas sensibilizadoras para células tumorales hipóxicas, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Actualmente la investigación y desarrollo de nuevos fármacos para el tratamiento del cáncer está orientada a mejorar su efectividad y selectividad de forma de disminuir los efectos secundarios indeseados de la mayoría de los fármacos de uso clínico actual. Un problema aún mayor es el tratamiento de las células hipóxicas de los tumores sólidos. Estas células se encuentran alejadas de los vasos sanguíneos resultando en un aumento en la resistencia a la quimio y radioterapia. Por otro lado una aproximación terapéutica de reciente desarrollo es el pre-tratamiento o sensibilización de las células tumorales con inhibidores de deacetilasas de histonas (iHDACs) previo al tratamiento con el fármaco de elección.. El desarrollo actual de iHDACs está orientado a la generación de inhibidores más selectivos para HDACs de clase I o de clase II. Recientemente se ha encontrado que la HDAC7, de clase II, está relacionada con la disminución de la expresión de genes relacionados la supervivencia de la célula tumoral en condiciones de hipoxia. De esta forma en el presente proyecto se plantea desarrollar un método predictivo de actividad anti-HDAC7 mediante métodos teóricos de docking molecular y estudiar el efecto de sensibilización de las células tumorales hipóxicas con inhibidores de deacetilasas de histonas selectivos para HDAC7.

*Tipo:* Investigación

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

*Equipo:* Mercedes González(Integrante); Alicia Merlino(Integrante); Mauricio Cabrera(Integrante); María Laura Lavaggi(Responsable); Wilner Martínez López(Integrante); Mariana Gonda(Integrante)

*Financiadores:* Otra institución nacional / Comisión Honoraria de Lucha contra el Cáncer / Apoyo financiero

2013 - 2013

*Título:* Estudios teóricos de la interacción de galactósidos sintéticos con las enzimas galectina-1 y concanavalina A, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Responsable científica en el marco de la colaboración establecida en Diciembre 2012 entre la Dra. Cecilia Giacomini (Cátedra de Bioquímica, Facultad de Química) y quien escribe

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:*

*Equipo:* Williams Porcal(Integrante); Cecilia Giacomini(Integrante)

*Financiadores:* Facultad de Ciencias - UDeLaR / Cooperación

2013 - 2015

*Título:* Diseño y Síntesis de profármacos con mecanismo de acción dual para el tratamiento de tumores sólidos, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Colaboradora y responsable del diseño racional asistido por computadora de distintos profármacos

*Tipo:* Investigación

*Alumnos:* 1(Maestría/Magister),

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

2013 - 2015

*Título:* Diseño y Síntesis de profármacos con mecanismo de acción dual para el tratamiento de tumores sólidos, *Tipo de participación:* Otros/Asesor,

*Tipo:* Investigación

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

*Equipo:* Alicia Merlino(Integrante); María Laura Lavaggi(Responsable); Lucía Minini(Integrante)

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

2014 - 2015

*Título:* Inhibición selectiva de Triosafosfato Isomerasa (TIM) como estrategia para el desarrollo de fármacos de uso veterinario contra la garrapata *Rhipicephalus microplus*, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Cooperación bilateral con Brasil CNPq-DiCyT

*Tipo:* Investigación

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

*Equipo:* Mauricio Cabrera(Integrante); Guzmán Álvarez(Integrante); Lucía Minini(Integrante); Ileana Corvo(Integrante); Lía Randall(Integrante)

*Financiadores:* Facultad de Ciencias - UDeLaR / Cooperación

## Producción científica/tecnológica

En el año 2010 defendí la Tesis de Doctorado, dirigida por los Dres. Hugo Cerecetto y Mercedes González. Durante el desarrollo del proyecto de tesis se trabajó en el diseño y síntesis de nuevos fármacos antichagásicos híbridos, estudiándose la actividad frente a *T. cruzi*, toxicidad inespecífica frente a células mamíferas y actividad frente a cruzipaina utilizando abordajes experimentales y computacionales. Los resultados obtenidos durante mis estudios de posgrado han dado lugar a dos publicaciones en la revista Medicinal Chemistry Communications. Desde Junio de 2009, ocupé el cargo de Profa. Adjunta en el Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC) donde continúo trabajando en el estudio de interacciones ligando-proteína utilizando técnicas teóricas de docking y dinámica molecular (estudio del modo de interacción de nitroalquenos con las proteínas COX-1 y COX-2, predicción de la estructura 3D de la enzima fumarato reductasa de *T. cruzi* y *Leishmania major* y estudio de la capacidad inhibitoria de compuestos de V(IV), Pt(II) y Pd(II), utilización de métodos QSAR basados en agrupamiento jerárquico y análisis de componentes principales para predecir la actividad anti-cancerígena de distintos complejos de Pt(IV) así como para la predicción de la actividad anti *T. cruzi* y mecanismo de acción de distintos complejos de Pt(II)/Pd(II) conteniendo tiosemicarbonas como ligandos, diseño racional de inhibidores de las enzimas cruzipaina y triosafosfato isomerasa de *T. cruzi*) en colaboración con distintos grupos de investigación. Estos trabajos han dado lugar a diversas presentaciones en congresos nacionales e internacionales y a publicaciones en revistas arbitradas. En 2012 he comenzado a trabajar en la línea de investigación "Desarrollo de inhibidores de caspasa-3 para el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer" de la cual soy responsable participando en el diseño y supervisión de

estudios teóricos enfocados a identificar determinantes estructurales responsables de la actividad/selectividad frente a caspasa-3 y que constituirán una base sólida para el diseño racional de nuevas entidades químicas. La Lic. Lucía Minini comenzó en 2013 su Posgrado en Química en este tema bajo mi orientación y la de la Dra. María Laura Lavaggi. En 2014 fue beneficiaria de una Beca de Maestría ANII, realizando en diciembre de 2015 la defensa intermedia para pasaje a estudios de Doctorado que está realizando bajo mi orientación y la de las Dras. Lavaggi y Beatriz Álvarez y en 2016 le fue otorgada una beca de doctorado ANII. Además, en el periodo 2014-2015 la Lic. Saira Cancela realizó su Tesina de Graduación de Licenciatura en Bioquímica también en esta temática bajo mi dirección y la de la Dra. Paola Hernández y fue beneficiaria de una Beca ANII de Iniciación a la Investigación. Actualmente está desarrollando el Posgrado en Química, bajo mi orientación y la co-orientación de las Dras. Paola Hernández y Patricia Lagos. En 2015, nos fue financiado un proyecto CSIC I+D del cual soy responsable, lo que nos ha permitido avanzar considerablemente en el hallazgo de nuevos inhibidores reversibles de caspasa-3. En el ámbito docente participo activamente desde 2009 en el dictado de los cursos regulares del LQTC (grado/especialización).

## Producción bibliográfica

### Artículos publicados

#### Arbitrados

Completo

GUERRA, A; GONZALEZ-NARANJO, P; CAMPILLO, NE; VARELA, J; LAVAGGI, ML; MERLINO, A.; CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M.; GOMEZ-BARRIO, A; ESCARIO, JA; FONSECA-BERZAL, C; YALUF, G; PANIAGUA-SOLIS, J; PáEZ, JA  
Novel Imidazo[4,5-c][1,2,6]thiadiazine 2,2-dioxides as antiproliferative trypanosoma cruzi drugs: Computational screening from neural network, synthesis and in vivo biological properties. European Journal of Medicinal Chemistry (electrónico), v.: 136, 2017

Medio de divulgación: Internet ; ISSN: 17683254 ; DOI: 10.1016/j.ejmech.2017.04.075



Completo

AGUILERA, E.; VARELA, J; BIRRIEL, E; SERNA, E.; TORRES, S.; YALUFF, G.; VERA DE BILBAO, N.; AGUIRRE-LÓPEZ, B; CABRERA, N; DÍAZ MAZARIEGOS, S.; TUENA DE GÓMEZ-PUYOU, M; TUENA DE GÓMEZ-PUYOU, M; PÉREZ-MONTFORT, R; MININI, L; MERLINO, A.; CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M.; ÁLVAREZ, G  
Potent and Selective Inhibitors of Trypanosoma cruzi Triosephosphate Isomerase with Concomitant Inhibition of Cruzipain: Inhibition of Parasite Growth through Multitarget Activity. ChemMedChem (E), 2016

Medio de divulgación: Internet ; Lugar de publicación: Wiley ; ISSN: 18607187 ; DOI: 10.1002/cmdc.201500385

[http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/\(ISSN\)1860-7187](http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/(ISSN)1860-7187)



Completo

MOURGLIA-ETTLIN, G; MERLINO, A.; CAPURRO, R; DEMATTEIS, S

Susceptibility and resistance to Echinococcus granulosus infection: Associations between mouse strains and early peritoneal immune responses. Immunobiology, v.: 221, p.: 418 - 426, 2016

Medio de divulgación: Internet ; Lugar de publicación: Elsevier ; ISSN: 01712985 ; DOI: 10.1016/j.imbio.2015.11.012

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0171298515300991>



Completo

MERLINO, A.; FERRARO, F.; DELLOCA N; GIL J.; TORT J.F.; GONZÁLEZ, M.; CERECETTO, H.; CABRERA, M; CORVO, I.

Identification of Chalcones as Fasciola hepatica Cathepsin L Inhibitors Using a Comprehensive Experimental and Computational Approach. PLoS Neglected Tropical Diseases, v.: 10 7, 2016

Medio de divulgación: Internet ; ISSN: 19352735 ; DOI: 10.1371/journal.pntd.0004834

<http://journals.plos.org/plosntds/article?id=10.1371/journal.pntd.0004834>



Completo

MININI, L.; ÁLVAREZ, G.; GONZÁLEZ, M.; CERECETTO, H.; MERLINO, A.

Molecular docking and molecular dynamics simulation studies of Trypanosoma cruzi triosephosphate isomerase inhibitors. Insights into the inhibition mechanism and selectivity. Journal of molecular graphics & modelling, v.: 58, p.: 40 - 49, 2015

*Palabras clave:* TcTIM-inhibitors; molecular docking; Molecular dynamics; Selective TcTIM inhibitors; Dimer-disrupting inhibitors; Rational drug design

*Areas del conocimiento:* Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* Elsevier Masson SAS ; *ISSN:* 10933263 ; *DOI:* 10.1016/j.jmgm.2015.02.002



SCOPUS



Completo

SCALESE, G.; BENÍTEZ, J.; ROSTÁN, S.; CORREIA, I.; BRADFORD, L.; VIEITES, M.; MININI, L.; MERLINO, A.; COITIÑO, E.L.; BIRRIEL, E.; VARELA, J.; CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M.; COSTA, J.; GAMBINO, D.

Expanding the family of heteroleptic oxidovanadium(IV) compounds with salicylaldehyde semicarbazones and polypyridyl ligands showing anti-Trypanosoma cruzi activity. Journal of Inorganic Biochemistry, v.: 147, p.: 116 - 125, 2015

*Medio de divulgación:* Internet ; *ISSN:* 01620134 ; *DOI:* 10.1016/j.jinorgbio.2015.03.002

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/01620134>



SCOPUS



Completo

RODRIGUEZ ARCE, E.; MOSQUILLO, MF.; PÉREZ, L.; ETCHEVERRÍA, G.; PIRO, OE.; MERLINO, A.; COITIÑO, E.L.; RIBEIRO, CM.; LEITE, CQF.; PAVAN, FR.; OTERO, L.; GAMBINO, D.

Aromatic amine N-oxide organometallic compounds: searching for prospective agents against infectious diseases. Dalton Transactions, v.: 44, p.: 14453 - 14464, 2015

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* pub.rcs.org ; *ISSN:* 14779226 ; *DOI:* 10.1039/C5DT00557D

<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/dt/c5dt00557d#ldivAbstract>



SCOPUS



Completo

CELANO, L.; CUPERTINO DA SILVA, YK.; CATALDO, N.; GABAY, M.; MERLINO, A.; ALEXANDRE-MOREIRA, MS.; MOREIRA LIMA, L.; CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M.; THOMSON, L.

Analgesic and Anti-Inflammatory Properties of Arylnitroalkenes. Inflammation and Allergy - Drug Targets, v.: 14, p.: 19 - 28, 2015

*Palabras clave:* Antioxidants; prostaglandin H synthase inhibitors; inflammation; anti-inflammatory therapy; analgesia

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* Bentham ; *ISSN:* 18715281 ; *DOI:* 10.2174/1871528114666151022145930

<http://www.eurekaselect.com/135973/article>

SCOPUS



Completo

ÁLVAREZ, G.; AGUIRRE-LÓPEZ, B.; CABRERA, N.; TUENA DE GÓ MEZ-PUYOU, M.; GÓMEZ PUYOU, A.; PÉREZ-MONTFORT, R.; MERLINO, A.; GONZÁLEZ, M.; CERECETTO, H.

New chemotypes as Trypanosoma cruzi triosephosphate isomerase inhibitors. Deepening the mechanism of inhibition. Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry, v.: 29, p.: 198 - 204, 2014

*Areas del conocimiento:* Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* Informa Healthcare ; *ISSN:* 14756366 ; *DOI:* 10.3109/14756366.2013.765415

<http://informahealthcare.com/loi/enz>



SCOPUS



Completo

MERLINO, A.; VIEITES, M; GAMBINO, D.; COITIÑO, E.L.

Homology Modeling of *T. cruzi* and *L. major* NADH-dependent Fumarate Reductases: Ligand Docking, Molecular Dynamics Validation, and Insights on their Binding Modes. *Journal of molecular graphics & modelling*, v.: 48, p.: 47 - 59, 2014

Palabras clave: NADH-dependent fumarate reductase 3D structure; NADH/fumarate binding mode ; trypanosome fumarate reductases inhibitors; anti-trypanosomatids rational design; computational modeling

Areas del conocimiento: Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

Medio de divulgación: Internet ; Lugar de publicación: Elsevier Masson SAS ; ISSN: 10933263

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/10933263>

DOI: 10.1016/j.jmgm.2013.12.001



SCOPUS

Completo

RÍOS, N; VARELA, J; BIRRIEL, E; GONZÁLEZ, M.; CERECETTO, H.; MERLINO, A.; PORCAL, W.

Identification of novel benzimidazole derivatives as anti-*Trypanosoma cruzi* agents: solid-phase synthesis, structure–activity relationships and molecular docking studies. *Future Medicinal Chemistry (E)*, v.: 5 15, p.: 1719 - 1732, 2013

Palabras clave: Benzimidazole derivatives; Microwave-assisted solid-phase synthesis; SAR studies; molecular docking

Areas del conocimiento: Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

Medio de divulgación: Internet ; Lugar de publicación: Future Science Ltd ; ISSN: 17568927 ; DOI: 10.4155/fmc.13.160

<http://www.future-science.com/doi/pdf/10.4155/fmc.13.160>

SCOPUS



Completo

HONORATO, S.B.; PORCAL, W.; MERLINO, A.; ELLENA, J.; CERECETTO, H.; AYALA, A.P.; GONZÁLEZ, M.

Understanding the solid forms of 5E-phenylethenylbenzofuroxan with different in vivo anti-*T. cruzi* activity. *Revista Virtual de Química*, v.: 5, p.: 1179 - 1190, 2013

Palabras clave: anti-*T. cruzi* agents; 5E-Phenylethenylbenzofuroxan; solubility; bioavailability

Areas del conocimiento: Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

Medio de divulgación: Internet ; Lugar de publicación: Internet ; ISSN: 19846835 ; DOI: ISSN 1984-6835

[www.uff.br/RVQ/&#8206;](http://www.uff.br/RVQ/&#8206;)

SCOPUS



Completo

MERLINO, A.; BENÍTEZ, D.; CAMPILLO, NE; PÁEZ, JA; TINOCO, LW; GONZÁLEZ, M.; CERECETTO, H.

Amidines bearing benzofuroxan or benzimidazole 1,3-dioxide core scaffolds as *Trypanosoma cruzi*-inhibitors: Structural basis for their interactions with cruzipain. *MedChemComm*, v.: 3, p.: 90 - 101, 2012

Palabras clave: Cruzipaina; inhibidores; docking; RMN

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

Medio de divulgación: Internet ; Lugar de publicación: RCS Publishing ; ISSN: 20402503 ; DOI: 10.1039/c1md00223f

<http://pubs.rsc.org/en/journals/journalissues/md>



SCOPUS



Completo

MERLINO, A.; OTERO; GAMBINO; COITIÑO

In Search of Patterns over Physicochemical Properties and Pharmacological Activities for a Set of [MCl<sub>2</sub>(Thiosemicarbazone)] Complexes (M=Pt/Pd): Support for Multiple Mechanisms of Antichagasic Action Excluding DNA-Bonding in vivo?. *European Journal of Medical Chemistry*, v.: 46, p.: 2639 - 2651, 2011

Palabras clave: Chagas disease; Pt/Pd-thiosemicarbazone complexes; SAR on PCM/DFT descriptors; molecular docking; nitro-anion radicals

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

Medio de divulgación: Internet ; Lugar de publicación: Elsevier Masson SAS ; ISSN: 02235234 ; DOI: 10.1016/j.ejmech.2011.03.046

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/02235234>

Completo

CAPUTTO, ME; FABIAN, LE; MOGILIONI, AG; MOLTRASIO, GY; BENÍTEZ, D.; MERLINO, A.; RÍOS, N; CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M.; FINKIELSZTEIN, LM

Thiosemicarbazones derived from 1-indanones as new anti-Trypanosoma cruzi agents. European Journal of Medicinal Chemistry (electrónico), v.: 19, p.: 6818 - 6826, 2011

*Palabras clave:* thiosemicarbazones; molecular docking; cruzipain inhibitors

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

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* Elsevier Masson SAS ; *ISSN:* 17683254 ; *DOI:* 10.1016/j.bmc.2011.09.037

[http://www.elsevier.com/wps/find/journaldescription.cws\\_home/505813/description#description](http://www.elsevier.com/wps/find/journaldescription.cws_home/505813/description#description)

Completo

MERLINO, A.; BENÍTEZ, D.; CHÁVEZ, S.; DA CUNHA, J.; HERNÁNDEZ, P.; TINOCO, LW; CAMPILLO, N.; PÁEZ, J.A.; CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M.

Development of a second generation of amidinohydrazones, thio- and semicarbazones as Trypanosoma cruzi inhibitors bearing the benzofuroxan and benzimidazole 1,3-dioxide core scaffolds. MedChemComm, v.: 1, p.: 216 - 228, 2010

*Palabras clave:* docking; cruzipain; amidinohydrazones; thiosemicarbazones

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

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* RCS Publishing ; *ISSN:* 20402503 ; *DOI:* 10.1039/b000000x

<http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2010/MD/C0MD00085J>

Completo

MERLINO, A.; CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M.

Targets for anti-T. cruzi drugs in the post-genomic era. Current enzyme inhibition , v.: 6 4, p.: 195 - 210, 2010

*Palabras clave:* targets; T. cruzi; inhibitors; medicinal chemistry

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

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* Bentham Science Publishers ; *ISSN:* 15734080

<http://www.bentham.org/cej>

Completo

ÁLVAREZ, G; AGUIRRE-LÓPEZ, B; VARELA, J; CABRERA, M; MERLINO, A.; LÓPEZ, GV; LAVAGGI, M.L; PORCAL, W.; DI MAIO, R.; GONZÁLEZ, M.; CERECETTO, H.; CABRERA, N; PÉREZ-MONTFORT, R; TUENA DE GÓMEZ-PUYOU, M; TUENA DE GÓMEZ-PUYOU, M

Massive screening yields novel and selective Trypanosoma cruzi triosephosphate isomerase dimer-interface-irreversible inhibitors with anti-trypanosomal activity. European Journal of Medicinal Chemistry (electrónico), v.: 45, p.: 5767 - 5772, 2010

*Palabras clave:* T. cruzi; TIM; Massive screening

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

*Medio de divulgación:* Internet ; *ISSN:* 17683254 ; *DOI:* 10.1016/j.ejmech.2010.09.034

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/02235234>

Completo

BOIANI, M.; BOIANI, L.; MERLINO, A.; HERNÁNDEZ, P.; CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M.

Second Generation of 2H-benzimidazole 1,3-dioxide derivatives as anti-trypanosomatid agents: Synthesis, biological evaluation, and mode of action studies. European Journal of Medicinal Chemistry (electrónico), v.: 44 11, p.: 4426 - 4433, 2009

*Palabras clave:* 2H-Benzimidazole 1,3-dioxide; Chagas disease; Leishmaniasis; Mitochondrial dehydrogenases

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

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* Elsevier Masson SAS ; *ISSN:* 17683254 ; *DOI:* 10.1016/j.ejmech.2009.06.014 ;

*Idioma/Pais:* Inglés/Holanda

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/09680896>





Completo

BOIANI, M.; MERLINO, A.; GERPE, A.; PORCAL, W.; CROCE, F.; DEPAULA, S.; RODRÍGUEZ, M.A.; CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M.

o-Nitroanilines as major metabolic products of anti-Trypanosoma cruzi 5-phenylethenylbenzofuroxans in microsomal and cytosolic fractions of rat hepatocytes and in whole parasitic cells". *Xenobiótica*, v.: 39 3, p.: 236 - 248, 2009

*Palabras clave:* Chagas disease; benzofuroxan; metabolism; rat hepatocytes microsomes; rat hepatocytes cytosolic fraction; Trypanosoma cruzi

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Farmacología, toxicología

*Medio de divulgación:* Papel ; *Lugar de publicación:* Taylor & Francis Group, London ; *ISSN:* 00498254 ; *DOI:*

10.1080/00498250802691535

<http://dx.doi.org/10.1080/00498250802691535>



SCOPUS



Completo

CABRERA, M.; LAVAGGI, M.L.; HERNÁNDEZ, P.; MERLINO, A.; GERPE, A.; PORCAL, W.; BOIANI, M.; FERREIRA, A.; MONGE, A.; LÓPEZ DE CERAIN, A.; GONZÁLEZ, M.; CERECETTO, H.

Cytotoxic, mutagenic and genotoxic effects of new anti-T. cruzi 5-phenylethenylbenzofuroxans. Contribution of phase I metabolites on the mutagenicity induction. *Toxicology Letters*, v.: 190 2, p.: 140 - 149, 2009

*Palabras clave:* Mutagenicity; Genotoxicity; Metabolism

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

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* Elsevier Masson SAS ; *ISSN:* 03784274 ; *DOI:* 10.1016/j.toxlet.2009.07.006

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/03784274>



SCOPUS



Completo

Diego Castro; BOIANI, L.; BENÍTEZ, D.; HERNÁNDEZ, P.; MERLINO, A.; GIL, C.; OLEA-AZAR, C.; GONZÁLEZ, M.; CERECETTO, H.; PORCAL, W.

Anti-trypanosomatid benzofuroxans and deoxygenated analogues: Synthesis using polymer-supported triphenylphosphine, biological evaluation and mechanism of action studies. *European Journal of Medical Chemistry*, v.: 44 12, p.: 5055 - 5065, 2009

*Palabras clave:* Hybrid benzofuroxans; Mitochondrial dehydrogenases

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

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* Elsevier Masson SAS ; *ISSN:* 02235234 ; *DOI:* 10.1016/j.ejmech.2009.09.009

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/02235234>



SCOPUS



Completo

MERLINO, A.; GERPE, A.; BOIANI, M.; PORCAL, W.; FAGIOLINO, P.; GONZÁLEZ, M.; CERECETTO, H.

Development of a HPLC method for the determination of antichagasic phenylethenylbenzofuroxans and its major synthetic secondary products in the chemical production processes. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, v.: 47 1, p.: 88 - 94, 2008

*Palabras clave:* Phenylethenylbenzofuroxans; HPLC; Secondary product; Geometric isomers; Benzofurazans

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

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* Elsevier B.V., Amsterdam ; *ISSN:* 07317085 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/07317085>



SCOPUS

Completo

PORCAL, W.; MERLINO, A.; BOIANI, M.; GERPE, A.; GONZÁLEZ, M.; CERECETTO, H.

Arylethenylbenzofuroxan derivatives as drugs for Chagas disease: Multigram-batch synthesis using Wittig-Boden process. Organic process research & development, v.: 12 2, p.: 156 - 162, 2008

*Palabras clave:* Arylethenylbenzofuroxan; Multigram batch synthesis; Wittig-Boden conditions; Benzofurazans

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

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* Scientific Update LLP, UK ; *ISSN:* 10836160 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Inglaterra

<http://pubs.acs.org/journals/oprdfk/index.html>



SCOPUS

Completo

BOIANI, L.; DAVIES, C.; ARRENDONDO, C.; PORCAL, W.; MERLINO, A.; GERPE, A.; BOIANI, M.; PACHECO, J.P.; BASOMBRÍO, M.Á.; CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M.

In vivo studies of 5-arylethenylbenzofuroxans in acute murine models of Chagas disease. European Journal of Medicinal Chemistry (electrónico), v.: 43 10, p.: 2229 - 2237, 2008

*Palabras clave:* Chagas; Arylethenylbenzofuroxan; In vivo studies

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

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* Elsevier Masson SAS ; *ISSN:* 17683254 ; *DOI:* 10.1016/j.ejmech.2007.12.016

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/02235234>

Sistema Nacional de Investigadores



Completo

MERLINO, A.; BOIANI, M.; GONZÁLEZ, M.; CERECETTO, H.

2-Benzyl-2H-Benzimidazole 1,3-Dioxide Derivatives: A Spectroscopic and Theoretical Study. Spectrochimica acta. Part A, Molecular and biomolecular spectroscopy, v.: 67 2, p.: 540 - 549, 2007

*Palabras clave:* 2-Benzyl-2-methyl-2H-benzimidazole 1,3-dioxide; DFT calculations; Electronic spectra; NMR spectra; IR spectra; Mass spectrometry

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

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* Elsevier B.V., Amsterdam ; *ISSN:* 13861425 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/13861425>



SCOPUS

Completo

MERLINO, A.; PORCAL, W.; HERNÁNDEZ, P.; AGUIRRE, G.; BOIANI, L.; BOIANI, M.; FERREIRA, A.; DI MAIO, R.; CASTRO, A.; GONZÁLEZ, M.; CERECETTO, H.

Second Generation of 5-Ethenylbenzofuroxan Derivatives as Inhibitors of Trypanosoma Cruzi Growth: Synthesis, Biological Evaluation and Structure Activity Relationships. Bioorganic & Medicinal Chemistry, v.: 15 7, p.: 2768 - 2781, 2007

*Palabras clave:* Ethenylbenzofuroxans; Wittig reaction; T. cruzi

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

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* Elsevier B.V., Amsterdam ; *ISSN:* 09680896 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Holanda

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/09680896>



SCOPUS

Completo

HERNÁNDEZ, P.; MERLINO, A.; GERPE, A.; PORCAL, W.; PIRO, O.E.; GONZÁLEZ, M.; CERECETTO, H.

One pot synthesis of benzyltriphenylphosphonium acetates from the corresponding activated benzylic alcohols. Arkivoc, v.: 2006 11, p.: 128 - 136, 2006

*Palabras clave:* Phosphonium acetates; benzyl alcohols; Wittig reaction

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

*Medio de divulgación:* Internet ; *Lugar de publicación:* ARKAT, USA ; *ISSN:* 14246376 ; *Idioma/Pais:* Inglés/Estados Unidos

<http://www.arkat-usa.org>

SCOPUS

Artículos aceptados

## Arbitrados

Completo

MININI, L; FERRARO, F.; CANCELA, S; MERLINO, A.

Insight into the mechanism of action and selectivity of caspase-3 reversible inhibitors through in silico studies. Journal of Molecular Structure, 2017

*Palabras clave:* Alzheimer's Disease; caspase-3 inhibitors; molecular docking; MD simulations; Rational drug design

*Medio de divulgación:* Internet ; *ISSN:* 00222860



## Texto en periódicos

Revista

MERLINO, A.; MARTÍNEZ, N.; LORENZO, D; MÁRQUEZ, V.; VÁZQUEZ, A.; CESIO, V.; HEINZEN, H.; DELLACASSA, E.

Impacto sensorial del procesamiento de la yerba mate sobre la composición volátil , Asociación de Química y Farmacia del Uruguay , v: 51 , p: 2935 , 2007

*Palabras clave:* compuestos volátiles en yerba mate; cromatografía gaseosa; espectrometría de masas

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

*Medio de divulgación:* Papel; *Lugar de publicación:* Uruguay;

## Producción técnica

### Productos

Prototipo , Fármacos y similares

CORVO, I.; CABRERA, M; FERRARO, F.; MERLINO, A.; GONZÁLEZ, M.; CERECETTO, H.; TORT, J

Naftilchalconas para el control de fasciolosis y otras trematodiasis mediante inhibición de catepsinas L , Patente de Invención , 2016

*Aplicación:* NO

*Medio de divulgación:* Papel; *Disponibilidad:* Restringida; *Ciudad:* /Uruguay

Presentada ante la DNPI el 14/12/2016

Prototipo , Fármacos y similares

MERLINO, A.; CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M.; BOIANI, M.

Derivados de 1,3-dióxido de benzimidazol. Procedimiento de preparación y utilización , 2005

*Aplicación:* NO

### Patente ó Registro

Patente de invención

UR 29076 , Derivados de 1,3-dióxido de benzimidazol

*Fechas:* *Deposito:* 01/07/2005; *Examen:* 00/00/0000; *Concesión:* 00/00/0000

*Patente nacional:* SI

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

*Medio de divulgación:* Otros; *Disponibilidad:* Restringida; *Ciudad:* /Uruguay

## Evaluaciones

Evaluación de Proyectos

2014 / 2014

*Institución financiadora:* ANII

*Cantidad:* Menos de 5

ANII

Evaluación de 3 proyectos para becas de posgrado nacionales

Evaluación de Publicaciones

2015

*Nombre:* Theoretical Biology and Medical Modelling,

*Cantidad:* Menos de 5

Revisión del artículo 'Identification of drug target and drug template of Enzyme- inhibitor complex by Trifluoperazine on Trypanothione reductase to control Chagas disease'

Evaluación de Publicaciones

2014

*Nombre:* Journal of Molecular Modeling,

*Cantidad:* Menos de 5

Revisión del artículo 'Molecular modeling and simulation of human eNOS reductase domain, an enzyme involved in release of vascular Nitric Oxide'

Evaluación de Publicaciones

2014

*Nombre:* SpringerPlus,

*Cantidad:* Menos de 5

Revisión del artículo 'INTERACTIONS OF ANTIPARASITIC STEROLS WITH STEROL 14 $\alpha$ -DEMETHYLASE (CYP51) OF HUMAN PATHOGENS'

Evaluación de Publicaciones

2014

*Nombre:* Arabian Journal of Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5

Revisión del artículo 'Novel 2,5-Disubstituted-1,3,4-Oxadiazole Derivatives Induce Apoptosis in HepG2 Cells Through p53 Mediated Intrinsic Pathway'

Evaluación de Publicaciones

2014

*Nombre:* Journal of Biological Chemistry,

*Cantidad:* Menos de 5

A solicitud de la Dra. Beatriz Álvarez colaboré en la revisión del artículo 'Identification of small molecule inhibitors of type III secretion system ATPase EscN from enteropathogenic E. coli'

Evaluación de Convocatorias Concursables

2013 / 2014

*Nombre:* Llamado a Grado 1 efectivo del Laboratorio de Química Teórica y Computacional,

*Cantidad:* Menos de 5

Facultad de Ciencias

Sistema Nacional de Investigadores

## Formación de RRHH

### Tutorías concluidas

#### Posgrado

*Tesis de maestría*

*Diseño racional, síntesis y estudio del mecanismo de acción de inhibidores reversibles de caspasa-3 como potenciales fármacos frente a la enfermedad de Alzheimer , 2013*

*Tipo de orientación:* Cotutor en pie de igualdad

*Nombre del orientado:* Lucía Minini

*Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)*

*Areas del conocimiento:* Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

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

*Información adicional:* Realizó pasaje a doctorado en diciembre 2015

#### Grado

Sistema Nacional de Investigadores

Tesis/Monografía de grado

Estudio de nitronas como inhibidores de apoptosis mediada por caspasa-3 , 2015

*Tipo de orientación:* Cotutor en pie de igualdad

*Nombre del orientado:* Saira Cancela

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Bioquímica

*Palabras clave:* moduladores de apoptosis; caspasa-3; inhibidores de caspasa-3; nitronas

*Areas del conocimiento:* Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

*Pais/Idioma:* Uruguay/Español

## Otras

Iniciación a la investigación

Estudio del mecanismo de inhibición de la activación de caspasa-3 por nitronas , 2014

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Saira Cancela

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Co-tutora: Paola Hernández, Laboratorio de Epigenética e Inestabilidad Genómica, IIBCE

Iniciación a la investigación

Diseño racional y síntesis en fase sólida de bencimidazoles inhibidores de cruzipaina con potencial aplicación antichagásica , 2011

*Tipo de orientación:* Cotutor en pie de igualdad

*Nombre del orientado:* Natalia Ríos

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* docking molecular; Inhibidores de cruzipaina

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

*Medio de divulgación:* Otros, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Tutor: Dr. Williams Porcal, Laboratorio de Química Orgánica, Grupo de Química Médica, Facultad de Ciencias

Iniciación a la investigación

Investigación y desarrollo de inhibidores irreversibles de enzimas de T. cruzi , 2011

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Lucía Minini

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* docking molecular; T. cruzi; trisafostato isomerasa

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

*Medio de divulgación:* Otros, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Cotutor: Dr. Hugo Cerecetto, Laboratorio de Química Orgánica, Grupo de Química Médica, Facultad de Ciencias.

Otras tutorías/orientaciones

Diseño racional asistidos por computadora de inhibidores selectivos de caspasa-3 humana , 2013

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Florencia Ferraro

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Areas del conocimiento:* Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

*Pais/Idioma:* Uruguay/Español

#### Otras tutorías/orientaciones

Diseño racional asistidos por computadora de inhibidores selectivos de caspasa-3 humana , 2013

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Saira Cancela

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Areas del conocimiento:* Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

*Pais/Idioma:* Uruguay/Español

#### Otras tutorías/orientaciones

Estudios teóricos del efecto de mutaciones en la enzima VHL y su interacción con HIF-1 y elonguina B y C , 2013

*Tipo de orientación:* Cotutor o Asesor

*Nombre del orientado:* Cecilia Mathó

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Areas del conocimiento:* Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

*Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* La estudiante Cecilia Mathó que se encuentra realizando su Tesis de Doctorado en Buenos Aires, realizó una pasantía de investigación durante dos semanas (9/22/2013-9/8/2013) en el Laboratorio de Química Teórica y Computacional bajo orientación y la de la Dra Coitiño.

Sistema Nacional de Investigadores

#### Otras tutorías/orientaciones

Estudio teórico del efecto de mutaciones en la enzima VHL y su interacción con HIF-1 y elonguina B y C , 2011

*Tipo de orientación:* Cotutor o Asesor

*Nombre del orientado:* Cecilia Mathó

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

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

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

*Información adicional:* La estudiante Cecilia Mathó que se encuentra realizando su tesis de posgrado en Buenos Aires, realizó una pasantía de investigación durante una semana (8/8/2011-12/8/2011) en el Laboratorio de Química Teórica y Computacional bajo mi orientación y la de la Dra Coitiño.

#### Otras tutorías/orientaciones

Purificación y ensayos de actividad de la principal proteasa de T. cruzi, Cruzipaína , 2010

*Tipo de orientación:* Tutor único o principal

*Nombre del orientado:* Natalia Rios

Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay

*Palabras clave:* Cruzipaína; T. cruzi

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

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

#### Otras tutorías/orientaciones

Estudio de la relación estructura-actividad biológica de distintos complejos radicalarios de Pt(II)/Pd(II) conteniendo agrupamientos 5-nitrofuriltiosemicarbazona , 2010

*Tipo de orientación:* Cotutor o Asesor

*Nombre del orientado:* Lucía Minini

*Palabras clave:* radicales aniónicos; complejos de Pt/Pd; compuestos anti-T. cruzi

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

*Medio de divulgación:* Otros, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Proyecto colaborativo con la Dra. Dinorah Gambino, Cátedra de Química Inorgánica, Facultad de Química.

Cotutor: Dra. Laura Coitiño

## Tutorías en marcha

### Posgrado

#### Tesis de maestría

Nitronas como potenciales fármacos neuroprotectores para el tratamiento de la Enfermedad de Alzheimer: un abordaje multidisciplinario , 2016

*Tipo de orientación:* Cotutor en pie de igualdad

*Nombre del orientado:* Saira Cancela

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Co-tutoras: Paola Hernández y Patricia Lagos

#### Tesis de doctorado

Diseño racional, síntesis y estudio del mecanismo de acción de inhibidores reversibles de caspasa-3 como potenciales fármacos frente a la enfermedad de Alzheimer , 2016

*Tipo de orientación:* Cotutor en pie de igualdad

*Nombre del orientado:* Lucía Minini

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Áreas del conocimiento:* Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

*Medio de divulgación:* Otros, *Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Co-tutoras: Ma Laura Lavaggi y Beatriz Álvarez

#### Tesis de maestría

Diseño racional, síntesis y caracterización bio-estructural de derivados de flavonoides inhibidores de catepsinas de Fasciola hepática como potenciales fármacos antihelmínticos , 2015

*Tipo de orientación:* Cotutor en pie de igualdad

*Nombre del orientado:* Florencia Ferraro

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

*Pais/Idioma:* Uruguay/Español

*Información adicional:* Tutores: Ileana Cabrera e Ileana Corvo

## Sistema Nacional de Investigadores

### Otros datos relevantes

#### Premios y títulos

2008 Integrante del SNI-Candidato a Investigador (Nacional) ANII

2010 Investigador Grado 3 PEDECIBA QUÍMICA

2014 Integrante del SNI- Investigador Activo- Nivel I (Nacional) ANII

#### Jurado/Integrante de comisiones evaluadoras de trabajos académicos

*Candidato:* Lorena Téliz

MERLINO, A.

Síntesis y caracterización biológica preliminar de nitrosotio-derivados de #-tocoferol diseñados como potenciales agentes antitumorales , 2014

(Licenciatura en Bioquímica) - Facultad de Ciencias - UDeLaR - Uruguay

*Referencias adicionales:* Uruguay , Español

#### Presentaciones en eventos

Congreso

Molecular level characterization of conformational changes induced by diarylidene ketone inhibitors into Trypanosoma cruzi triosephosphate isomerase through molecular dynamics simulations , 2016

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 26

*Referencias adicionales:* Noruega; *Nombre del evento:* ISQBP President's Meeting 2016; *Nombre de la institución promotora:* University of Bergen

Congreso

In silico design, DNA interaction, synthesis and biological evaluation of inhibitors of hypoxia-inducible factor ( HIF-1 ) as antitumor agents , 2016

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 26

*Referencias adicionales:* Noruega; *Nombre del evento:* ISQBP President's Meeting 2016; *Nombre de la institución promotora:* University of Bergen

Presentado por Ma Laura Lavaggi. Autores: Lucía Minini, Maíra De Negri, Alicia Merlino, María Laura Lavaggi

Congreso

Novel compounds as selective inhibitors of caspase-3: organic synthesis, in silico and in vitro evaluation , 2016

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 27

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* 45a Reunião Anual da SBBq; *Nombre de la institución promotora:* Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular

Presentado por Lucía Minini. Autores: Lucía Minini, Paola Hernández, María Laura Lavaggi, Alicia Merlino.

Congreso

Molecular Docking and molecular dynamics of DNA with 2,3-amine/hidroxiphenazine 5,10 dioxides: insights into molecular mechanisms for inhibition of DNA recognition by HIF-1 in solid tumors , 2016

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 35

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* QUITEL 2016;

Presentado por Lucía Minini. Autores: Lucía Minini, Alicia Merlino, María Laura Lavaggi

Congreso

Nitrones as potencial neuroprotective agents for the treatment of Alzheimer's disease , 2016

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 35

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* QUITEL 2016;

Presentado por Saira Cancela. Autores: Saira Cancela, Paola Hernández, Williams Porcal, Alicia Merlino

Congreso

In route to decipher the molecular basis of HAMLET's antitumoral activity: a comparison of alfa-Lactalbumin interactions with oleic and stearic acids , 2016

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 35

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* QUITEL 2016;

Presentado por Florencia Ferraro. Autores: Florencia Ferraro, Florencia Klein, Alicia Merlino, Laura Coitiño

Congreso

Exploring the nature of the catalytic mechanism of a soluble NADH-dependent Fumarate Reductase from Trypanosoma cruzi , 2016

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 35

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* QUITEL 2016;

Presentado por Santiago Sastre. Autores: Santiago Sastre, Alicia Merlino, Laura Coitiño

Congreso

Toward Selective Caspase-3 Inhibitors Development: Molecular Docking and Molecular Dynamics Simulations of Caspase-3 and Caspase-7 , 2015

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 32

*Referencias adicionales:* Italia; *Nombre del evento:* TheoBio2015; *Nombre de la institución promotora:* Università degli studi di Cagliari

Congreso

Evaluation of new potential histone deacetylase-7 inhibitors as sensitizers of tumor cells to chemotherapy , 2015

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* 23rd International Congress of the IUBMB and 44th Annual Meeting of the Brazilian Society for Biochemistry and Molecular Biology (SBBq);

Congreso

Nitrones as inhibitors of apoptosis in neuronal cells , 2015

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* 23rd International Congress of the IUBMB and 44th Annual Meeting of the Brazilian Society for Biochemistry and Molecular Biology (SBBq);

Congreso

Nitrones as potential therapeutic agents against Alzheimer's Disease , 2015

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 20

*Referencias adicionales:* Estados Unidos; *Nombre del evento:* 4th International Conference on Medicinal Chemistry and Computer Aided Drug Designing; *Nombre de la institución promotora:* OMICS International

Congreso

Clustering of immune responses associated with susceptibility or resistance to Echinococcus granulosus through principal components analysis , 2015

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* IV LASID; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Argentina de Inmunología

Autores: Gustavo Mourglia-Ettlin, Alicia Merlino, Sylvia Dematteis



Congreso

Stability and dynamics of VBC-HIF complexes under normoxic and hypoxic conditions , 2014

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

*Referencias adicionales:* Chile; *Nombre del evento:* WATOC 2014; *Nombre de la institución promotora:* Pontificia Universidad Católica de Chile

Congreso

Design of Prospective Antiparasitic Oxidovanadium(IV) Compounds: DNA Interaction Studies , 2014

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

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* IV Latin American Meeting on Biological Inorganic Chemistry; *Nombre de la institución promotora:* CONICET

Congreso

Estudio del mecanismo de inhibición de la activación de caspasa-3 por nitronas , 2014

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 24

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* XV Jornadas de la SUB; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Uruguaya de Biociencias

Congreso

Modelos de la interacción entre el ácido oleico y la  $\alpha$ -lactalbumina en HAMLET: camino a entender las causas de su actividad antitumoral , 2014

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 24

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* XV Jornadas de la SUB; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Uruguaya de Biociencias

Congreso

Diseño in silico y síntesis de inhibidores del factor inducible por hipoxia agentes antitumorales. , 2014

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 24

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* XV Jornadas de la SUB; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Uruguaya de Biociencias

Congreso

Boronated derivatives of coumarin as novel probes for peroxynitrite detection , 2013

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 38

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

Congreso

Diseño, modelado y síntesis de profármacos inhibidores de la acción de HIF-1 con afinidad por la secuencia HRE , 2013

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 35

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* XIX Simposio Nacional de Química Orgánica; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Argentina de Investigación en Química Orgánica

Congreso

Docking y dinámica molecular aplicados al diseño racional de inhibidores selectivos de caspasa-3 , 2013

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 26

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 2da Jornadas +Biofísica;

Congreso

Modelado del dominio central de fumarato reductasas de T. cruzi y L. major: perspectivas para el diseño de inhibidores , 2013

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 26

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 2da Jornadas +Biofísica;

Congreso

Estabilidad y dinámica de los complejos VBC-HIF-1  $\alpha$ ; en condiciones de normoxia e hipoxia , 2013

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 26

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 2da Jornadas +Biofísica;

Congreso

Diseño racional de inhibidores selectivos de enzimas esenciales para la vida del parásito Trypanosoma cruzi , 2012

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 28

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* XIV Jornadas de la SUB ; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Uruguaya de Biociencias

Congreso

Interacción de la enzima ciclooxigenasa con ácido nitroaraquidónico: Rol de la His388 , 2012

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 28

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* XIV Jornadas de la SUB; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Uruguaya de Biociencias

Congreso

Modelado por homología de la enzima Fumarato Reductasa de Trypanosoma cruzi y Leishmania major. Estudio de la capacidad inhibitoria de complejos metálicos mediante docking molecular , 2012

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 28

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* XIV Jornadas de la SUB; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Uruguaya de Biociencias

Congreso

Análisis de la interacción nitrolípidos-PPARgamma: un enfoque molecular preliminar , 2012

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 28

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* XIV Jornadas de la SUB; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Uruguaya de Biociencias

Congreso

Molecular Dynamics simulations of Trypanosoma cruzi triosephosphate isomerase inhibitors: Insights into the inhibition mechanism and selectivity , 2012

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

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* QUITEL 2012;

Congreso

Rational design and solid-phase synthesis of novel benzimidazole derivatives as potential cruzipain inhibitors , 2012

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

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* 6th Brazilian Symposium of Medicinal Chemistry ;

Congreso

Molecular docking studies and binding mode prediction of novel T. cruzi triosephosphate isomerase inhibitors , 2011

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 32

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* XL Reunión annual de la SBBq; *Nombre de la institución promotora:* SBBq

*Palabras clave:* T. cruzi TIM inhibitors; molecular docking

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

Congreso

Unraveling the mechanism of action of bioactive Pt/Pd-thiosemicarbazone complexes with the aid of conceptual DFT and Fukui indexes , 2011

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

*Referencias adicionales:* República Checa; *Nombre del evento:* Quantum Bioinorganic Chemistry 3;

Congreso

Diseño racional de inhibidores selectivos para la enzima triosafosfato isomerasa de Trypanosoma cruzi. , 2011

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

*Referencias adicionales:* República Checa; *Nombre del evento:* ENAQUI; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA-Química

Congreso

Derivados de benzofuroxano y 1,3-dióxido de benzimidazol conteniendo agrupamientos arilguanidina como inhibidores de cruzipaina , 2010

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 35

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* XIII Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Uruguaya de Biociencias

*Palabras clave:* arilguanidinas; Cruzipaina; bioinformática

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

Congreso

Guanidine containing benzofuroxan and benzimidazole 1,3-dioxide scaffolds as cruzipain-T. cruzi inhibitors , 2010

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 29

*Referencias adicionales:* Bélgica; *Nombre del evento:* EFMC-ISMC 2010. 21st International Symposium on Medicinal Chemistry; *Nombre de la institución promotora:* Koninklijke Vlaamse Chemische Vereniging/Société Royale de Chimie

*Palabras clave:* guanidine-pharmacophore ; Cruzipain-T. cruzi; docking and NMR

Congreso

Insights into the mechanism of binding of nitro fatty acids to mammalian COX-2. , 2010

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 35

*Referencias adicionales:* Chile; *Nombre del evento:* 1st International Conference on Bioinformatics SolBio 2010; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Iberoamericana de Bioinformática/Centro de Bioinformática y Simulación Molecular (Univ. Talca, Chile)

*Palabras clave:* nitroarachidonate; cyclooxygenase; docking

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

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

Congreso

Utilización de un sencillo método de docking para predecir la capacidad de inhibición de cruzipáina de una serie de derivados de benzofuroxano , 2008

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* 3er Workshop Argentino de Química Medicinal;

*Palabras clave:* derivados de benzofuroxano; docking; Cruzipáina

Congreso

Síntesis y evaluación biológica de compuestos híbridos derivados del sistema benzofuroxano y 1,3-dióxido de benzimidazol , 2007

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 6

*Referencias adicionales:* España; *Nombre del evento:* XV Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Española de Química Terapéutica

*Palabras clave:* compuestos híbridos; benzofuroxano; 1,3-dióxido de benzimidazol

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

Congreso

Escalado de 5-(feniletetil)benzofuroxanos con actividad antichagásica , 2007

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 6

*Referencias adicionales:* España; *Nombre del evento:* XV Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Española de Química Terapéutica

*Palabras clave:* feniletetilbenzofuroxanos; Escalado

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

Congreso

Composición volátil de la yerba mate, impacto sensorial del proceso de elaboración , 2007

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 6

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* IX Simposio Argentino y XII Simposio Americano de Farmacobotánica; *Nombre de la institución promotora:* Universidad Nacional de Tucumán, Fundación Miguel Lillo y Secretaría de Desarrollo e Innovación

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

Congreso

Preclinical development of antichagasic benzofuroxans , 2007

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 6

*Referencias adicionales:* Eslovenia; *Nombre del evento:* 5th Joint Meeting on Medicinal Chemistry; *Nombre de la institución promotora:* Faculty of Pharmacy, University of Ljubljana

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

Congreso

Ethenylbenzofuroxans actives against T. cruzi: in vitro and in vivo studies , 2007

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 6

*Referencias adicionales:* Eslovenia; *Nombre del evento:* 5th Joint Meeting on Medicinal Chemistry; *Nombre de la institución promotora:* Faculty of Pharmacy, University of Ljubljana

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

Congreso

Quantitative Structure-Activity Relationship Studies Using Extracted Parameters from the NMR Experiment , 2007

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 8

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* 11th Nuclear Magnetic Resonance Users Meeting;

Congreso

Estudios de metabolización de agentes antichagásicos derivados de 5-(feniletetil)benzofuroxanos , 2007

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 6

*Referencias adicionales:* España; *Nombre del evento:* XV Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Española de Química Terapéutica

*Palabras clave:* 5-(feniletetil)benzofuroxanos; metabolización

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

Congreso

Synthesis and biological evaluation of heterocyclic hybrid compounds containing hydrazone/thiosemicarbazone and N-oxide moieties , 2006

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 8

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* 3rd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry; *Nombre de la institución promotora:* Universidad de San Pablo

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

Congreso

2-Benzyl-2H-Benzimidazole 1,3-Dioxide Derivatives: A Spectroscopic and Theoretical Study , 2006

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 8

*Referencias adicionales:* Argentina; *Nombre del evento:* Escuela de Invierno Giambiagi: Clusters, Molecules, Biomolecules and Materials; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

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

Congreso

Tuning the electron structure of [Ru(L)2dppz]<sup>2+</sup> DNA damage probes by environment: a DFT-PCM Study , 2006

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 8

*Referencias adicionales:* Italia; *Nombre del evento:* Conference on Drug Development for Third World Diseases; *Nombre de la institución promotora:* International Centre for Theoretical Physics

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

Congreso

Síntesis y evaluación biológica de derivados de 1,3-dióxido de 2H-benzimidazol , 2005

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 8

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* XI Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias; *Nombre de la institución promotora:* Sociedad Uruguaya de Biociencias

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

Congreso

Nuevos derivados de N-óxido como agentes tripanosomicidas. Generación de radicales libres y efecto sobre la respiración celular parasitaria , 2004

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 6

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

Congreso

Synthesis and biological characterisation of Nitroalkenes, Nitroaldols and Nitroalkanes , 2004

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 8

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* 2nd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry; *Nombre de la institución promotora:* Universidad Federal de Rio de Janeiro

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

Seminario

DFT and Data Mining characterization of a series of Pt(IV) prospective anticancer agents and their Pt(II) metabolites , 2010

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* España; *Nombre del evento:* IX Girona Seminar on Electron Density, Density Matrices, and Density Functional Theory;

Seminario

Investigación y desarrollo de nuevos fármacos anti T. Cruzi: Inhibidores de cruzaina derivados del sistema benzofuroxano y 1,3-dióxido de benzimidazol , 2007

*Tipo de participación:* Expositor oral,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Seminarios del Laboratorio de Química Orgánica;

## Simposio

Estudio de nitronas como inhibidores de apoptosis en células neuronales , 2015

*Tipo de participación:* Expositor oral, *Carga horaria:* 15

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* 9as Jornadas de la SBBM;

Presentado en forma oral por Saira Cancela. Autores: Saira Cancela, Paola Hernández, Alicia Merlino

## Simposio

Modelado y simulación de la estructura e interacciones en macromoléculas biológicas (adn/proteínas) , 2014

*Tipo de participación:* Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 8

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Modelización computacional de sistemas complejos de interés biológico y biomédico: recorriendo desde su divulgación hasta el conocimiento técnico; *Nombre de la institución promotora:* Regional Norte

## Simposio

Insights into the binding mode of 14-NO<sub>2</sub>AA to PGHS-1 and PGHS-2: clues from molecular dynamics simulations to propose inhibitory mechanisms , 2013

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

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* 17º Simpósio Brasileiro de Química Teórica;

*Palabras clave:* nitrolipids as PGHSs inhibitors; Molecular dynamic simulations

*Areas del conocimiento:* Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

# Sistema Nacional de Investigadores

## Simposio

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

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 24

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Foro de Innovaciones en Educación Superior; *Nombre de la institución promotora:* Comisión Sectorial de Enseñanza-UdelaR

## Encuentro

Singularidades del compuesto antitumoral oxaliplatino evidenciadas por comparación del potencial electrostático 3D , 2009

*Tipo de participación:* Poster,

*Referencias adicionales:* Uruguay; *Nombre del evento:* Singularidades del compuesto antitumoral oxaliplatino evidenciadas por comparación del potencial electrostático 3D; *Nombre de la institución promotora:* SBBM

*Palabras clave:* oxaliplatino

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

## Encuentro

Benzofuroxanos y di-N-óxidos de benzimidazol con actividad antichagásica: estudio como inhibidores de cruzipaína , 2009

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 21

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

*Palabras clave:* compuestos híbridos; docking; Cruzipaína

## Encuentro

Síntesis, Caracterización Espectroscópica y Evaluación Biológica de Derivados de 1,3-Dióxido de 2H- Benzimidazol , 2006

# Sistema Nacional de Investigadores

*Tipo de participación:* Poster, *Carga horaria:* 8

*Referencias adicionales:* Brasil; *Nombre del evento:* XIV Jornadas de Jóvenes Investigadores de la AUGM; *Nombre de la institución promotora:* Universidad de Campinas

## Indicadores de producción

<i>Producción bibliográfica</i>	<b>30</b>
<i>Artículos publicados en revistas científicas</i>	<b>28</b>
Completo (Arbitrada)	28
<i>Artículos aceptados para publicación en revistas científicas</i>	<b>1</b>
Completo (Arbitrada)	1
<i>Trabajos en eventos</i>	<b>0</b>
<i>Libros y capítulos de libros publicados</i>	<b>0</b>
<i>Textos en periódicos</i>	<b>1</b>
Revista	1
<i>Documentos de trabajo</i>	<b>0</b>
<i>Producción técnica</i>	<b>2</b>
<i>Productos tecnológicos</i>	<b>2</b>

Con registro o patente	1
Sin registro o patente	1
<i>Procesos o técnicas</i>	0
<i>Trabajos técnicos</i>	0
<i>Otros tipos</i>	0
<i>Evaluaciones</i>	7
Evaluación de Proyectos	1
Evaluación de Publicaciones	5
Evaluación de Convocatorias Concursables	1
<i>Formación de RRHH</i>	14
<i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</i>	11
Tesis de maestría	1
Tesis/Monografía de grado	1
Iniciación a la investigación	3
Otras tutorías/orientaciones	6
<i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha</i>	3
Tesis de maestría	2
Tesis de doctorado	1

Sistema Nacional de Investigadores