



Curriculum Vitae

Patricia SAENZ MÉNDEZ



Actualizado: 12/09/2017

Publicado: 12/09/2017

Sistema Nacional de Investigadores

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas

Categorización actual: Nivel II

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

Datos generales

Información de contacto

E-mail: psaenz@fq.edu.uy

Teléfono: 29241860

Dirección: Gral. Flores 2124, 11800 Montevideo, Uruguay

Institución principal

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

Dirección institucional

Dirección: Facultad de Química - UDeLaR / Computational Chemistry and Biology Group-DETEMA. Universidad de la República. Avda. Gral. Flores 2124 / 11800 / Montevideo / Montevideo / Uruguay

Teléfono: (+00598) 29241860

Fax: 29241906

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

Formación

Formación concluida

Formación académica/Titulación

Posgrado

2002 - 2006

Doctorado

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

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

Título: Aspectos Fisicoquímicos y Sintéticos de la Oligomerización de Ciclohexadienodios Quirales

Tutor/es: Gustavo Seoane - Oscar N. Ventura

Obtención del título: 2006

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

Palabras clave: Síntesis orgánica; Química Computacional; Mecanismos de Reacción; Teoría de Funcionales de la Densidad; Biotransformaciones; Ciclitales

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

Fisicoquímica Orgánica

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

1998 - 2000

Maestría

Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

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

Título: Síntesis y reactividad de N-óxido y N,N-dióxido de 1,2,4-triazinas. Estudio de la actividad biológica de derivados y su relación con la estructura

Tutor/es: Hugo Cerecetto-Mercedes González

Obtención del título: 2000

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

Palabras clave: Síntesis orgánica; Química Computacional; Química Medicinal

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

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

Grado

1996 - 1999

Grado

Química Farmacéutica

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

Obtención del título: 1999

Palabras clave: Química Farmacéutica

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Química Farmacéutica

1991 - 1996

Grado

Bachiller en Química

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

Obtención del título: 1996

Palabras clave: Bachiller en Química

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Química Farmacéutica

Formación complementaria

Postdoctorado

10 / 2015 - 09 / 2016

Inhibiting Pseudomonas aeruginosa, a multidrug resistant pathogen

Goteborgs Universitet , Suecia

Becario de: Goteborgs Universitet , Suecia

Palabras clave: Antibiotics; Drug design

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

01 / 2013 - 03 / 2013

1) Estudio de poli-farmacología de Sortasa A. 2) Estudio de sistemas enzimáticos relevantes en cáncer (enzimas de la superfamilia del Citocromo P450, DT-Diaforasa)

Goteborgs Universitet , Suecia

Becario de: Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR , Uruguay

Palabras clave: Bioinformática Estructural; Diseño de antibióticos; Diseño de compuestos antitumorales

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

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

04 / 2010 - 07 / 2010

Química Computacional y Biotecnología. Estudio de enzimas redox: peroxidases, monooxigenasas de la familia del citocromo P450 y oxigenasas

National University of Ireland, Galway , Irlanda

Becario de: Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR , Uruguay

Palabras clave: peroxidases; Química Computacional; Enzimas redox

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

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

2007 - 2008
 1) Biosíntesis y degradación de lignina. Química de la madera en CO₂ supercrítico. 2) diseño de nuevos fármacos forodinámicos. Modelado de la intercalación de derivados de furocumarinas en el ADN. 3) Exploración de la química redox de quinonas
 Örebro Universitet , Suecia
Becario de: Örebro Universitet , Suecia
Palabras clave: Química Teórica; Fotoquímica Orgánica; Lignina
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Físicoquímica Orgánica
 Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional

Cursos corta duración

05 / 2016 - 05 / 2016
 Writing a Pedagogic Portfolio
 Gothenburg University , Suecia
Palabras clave: Pedagogía
Areas del conocimiento: Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Pedagogía

05 / 2016 - 05 / 2016
 Communication and Feedback
 Gothenburg University , Suecia
Palabras clave: Motivación; Comunicación; Crítica constructiva
Areas del conocimiento: Ciencias Sociales / Sociología / Sociología / Recursos Humanos

2009 - 2009
 Reacciones dominó: una herramienta eficaz para la construcción molecular
 Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis Orgánica Avanzada

2007 - 2007
 Molecular Operating Environment (MOE) training
 Max Planck Gesellschaft , Alemania
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional
 Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Docking molecular
 Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica /

2006 - 2006
 Espectroscopía RMN avanzada
 Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Espectroscopía

2003 - 2003
 Síntesis orgánica moderna
 Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica

2002 - 2002
 Evaluación en Educación Superior
 Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Educación Universitaria

2002 - 2002
 Teoría de Funcionales de la Densidad
 Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

2002 - 2002
 Dinámica Molecular Aplicada al Estudio de Macromoléculas
 Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional
 Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Dinámica Molecular

2001 - 2001
 Reacciones Pericíclicas en Síntesis Orgánica
 Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica

2001 - 2001
 Cursillo sobre Determinación Estructural (cristalográfica) de Biomoléculas
 Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Cristalografía

2001 - 2001	Cursillo sobre Modelos de Evolución de Proteínas Facultad de Química - 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 Computacional
2000 - 2000	Espectroscopía Vibracional y Rmn Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Espectroscopía
2000 - 2000	Modelado Molecular y Espectros Electrónicos Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Espectroscopía Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Modelado Molecular
1997 - 1997	Química combinatoria, aplicación al descubrimiento de drogas Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de fármacos Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica /
1997 - 1997	Química Combinatoria Dinámica Molecular de Biomoléculas Facultad de Ciencias Exactas, Universidad de la Plata , Argentina <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional
1996 - 1996	Descubrimiento y desarrollo de nuevas drogas: estrategias, conceptos y aplicación Universidad Nacional de Córdoba , Argentina <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Medicinal Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica /
1995 - 1995	Diseño de fármacos Química Orgánica y Medicamentos Facultad de Química - UDeLaR, Universidad de la República , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de fármacos Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Medicinal

Otras instancias

2010	Seminarios <i>Nombre del evento:</i> Seminarios del Departamento de Química Orgánica (SEMIQO) <i>Institución organizadora:</i> Departamento de Química Orgánica , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química orgánica
2009	Seminarios <i>Nombre del evento:</i> Seminarios del Departamento de Química Orgánica (SEMIQO) <i>Institución organizadora:</i> Departamento de Química Orgánica , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
2008	Seminarios <i>Nombre del evento:</i> Seminarios del Departamento de Química Orgánica (SEMIQO) <i>Institución organizadora:</i> Departamento de Química Orgánica , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
2007	Seminarios <i>Nombre del evento:</i> Natural Sciences Department Meetings <i>Institución organizadora:</i> Natural Sciences Department, Örebro University , Suecia <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de fármacos Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Biotecnología

2006	Seminarios <i>Nombre del evento:</i> Seminarios del Departamento de Química Orgánica (SEMIQO) <i>Institución organizadora:</i> Departamento de Química Orgánica , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
2005	Seminarios <i>Nombre del evento:</i> Seminarios del Departamento de Química Orgánica (SEMIQO) <i>Institución organizadora:</i> Departamento de Química Orgánica , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
2004	Seminarios <i>Nombre del evento:</i> Seminarios del Departamento de Química Orgánica (SEMIQO) <i>Institución organizadora:</i> Departamento de Química Orgánica , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
2003	Seminarios <i>Nombre del evento:</i> Seminarios del Departamento de Química Orgánica (SEMIQO) <i>Institución organizadora:</i> Departamento de Química Orgánica , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
2002	Seminarios <i>Nombre del evento:</i> Seminarios del Departamento de Química Orgánica (SEMIQO) <i>Institución organizadora:</i> Departamento de Química Orgánica , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
2001	Seminarios <i>Nombre del evento:</i> Seminarios del Departamento de Química Orgánica (SEMIQO) <i>Institución organizadora:</i> Departamento de Química Orgánica , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
2000	Seminarios <i>Nombre del evento:</i> Seminarios del Departamento de Química Orgánica (SEMIQO) <i>Institución organizadora:</i> Departamento de Química Orgánica , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
1999	Seminarios <i>Nombre del evento:</i> Seminarios del Departamento de Química Orgánica (SEMIQO) <i>Institución organizadora:</i> Departamento de Química Orgánica , Uruguay <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
2016	Congresos <i>Nombre del evento:</i> XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (Quitel 2016) <i>Institución organizadora:</i> Facultad de Química - Facultad de Ciencias - Institut Pasteur Montevideo , Uruguay <i>Palabras clave:</i> Química Computacional; Biología computacional <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Biología Computacional Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional
2016	Congresos <i>Nombre del evento:</i> ISQBP (International Society of Quantum Biology and Pharmacology) President's Meeting 2016 <i>Institución organizadora:</i> University of Bergen , Noruega <i>Palabras clave:</i> Antibiotics; Computational Biology; Drug design <i>Areas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Diseño computacional de fármacos
2015	Congresos <i>Nombre del evento:</i> 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies - Pacifichem <i>Institución organizadora:</i> American Chemical Society, Canadian Society for Chemistry, Chemical Society of Japan, New Zealand Institute of Chemistry, Royal Australian Chemical Institute, Korean Chemical Society, Chinese Chemical Society , Estados Unidos <i>Palabras clave:</i> Computational Chemistry

- 2013
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional
 Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Biología Computacional
 Congresos
Nombre del evento: ENAQUI 3.0 Encuentro Nacional de Ciencias Químicas
Institución organizadora: PEDECIBA-Química , Uruguay
Palabras clave: Ciencias Químicas
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional
 Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Medicinal
 Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química orgánica
 Congresos
- 2012
Nombre del evento: XXXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina - QUITEL 2012
Institución organizadora: Brasil
Palabras clave: Química Computacional
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional
 Congresos
- 2012
Nombre del evento: 4th International IUPAC Conference on Green Chemistry
Institución organizadora: IUPAC , Brasil
Palabras clave: Química Orgánica; Química Verde
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Verde
 Congresos
- 2011
Nombre del evento: Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011
Institución organizadora: Universidad de Santiago de Compostela , España
Palabras clave: Computational Chemistry
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional
 Congresos
- 2011
Nombre del evento: Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Química - ENAQUI 2011
Institución organizadora: PEDECIBA-Química , Uruguay
Palabras clave: Ciencias Químicas
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química
 Congresos
- 2011
Nombre del evento: XVIII Simposio Nacional de Química Orgánica
Institución organizadora: SAIQO , Argentina
Palabras clave: Físicoquímica orgánica; Síntesis orgánica; Productos naturales
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química orgánica
 Congresos
- 2010
Nombre del evento: IV Encuentro Regional de Biocatálisis y Biotransformaciones
Institución organizadora: Facultad de Química , Uruguay
Palabras clave: Biocatálisis; Biotransformaciones
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Biotransformaciones
 Congresos
- 2010
Nombre del evento: High Performance Computing at the Chemistry/Biochemistry Interface - ICI (Institute of Chemistry of Ireland) Annual Conference
Institución organizadora: ICI (Institute of Chemistry of Ireland) , Irlanda
Palabras clave: Biomoléculas; Drug design
Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional

- 2009
Congresos
Nombre del evento: Primer Encuentro Nacional de Ciencias Químicas - ENAQUI 2009
Institución organizadora: PEDECIBA , Uruguay
Palabras clave: Ciencias Químicas
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Biotransformaciones
- 2009
Congresos
Nombre del evento: XVII-Simposio Nacional de Química Orgánica
Institución organizadora: SAIQO , Argentina
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Físicoquímica Orgánica
- 2009
Congresos
Nombre del evento: XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Institución organizadora: Universidad Nacional de Colombia , Colombia
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Orgánica
- 2007
Congresos
Nombre del evento: Modeling Interactions in Biomolecules III
Institución organizadora: Univerzita Karlova, Praga , República Checa
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Molecular de Biomoléculas
- 2007
Congresos
Nombre del evento: First Annual Theoretical Chemistry Symposium
Institución organizadora: Swedish Chemical Society , Suecia
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica
- 2005
Congresos
Nombre del evento: 11th Brazilian Meeting on Organic Synthesis
Institución organizadora: The Brazilian Chemical Society-Federal University of Santa Maria , Brasil
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
- 2005
Congresos
Nombre del evento: XV Simposio Nacional de Química Orgánica
Institución organizadora: SAIQO , Argentina
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Físicoquímica Orgánica
- 2004
Congresos
Nombre del evento: Primer Encuentro Regional: Biocatálisis y Biotransformaciones 2004
Institución organizadora: Facultad de Química , Uruguay
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Biotransformaciones
- 2002
Congresos
Nombre del evento: XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Institución organizadora: Facultad de Química , Uruguay
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

- 2001
Congresos
Nombre del evento: XII-Simposio Nacional de Química Orgánica. "Dr. Eduardo G. Gros"
Institución organizadora: SAIQO , Argentina
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Físicoquímica Orgánica
- 1999
Congresos
Nombre del evento: XI Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica
Institución organizadora: Sociedad Española de Química Terapéutica , España
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Medicinal
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de fármacos
- 1998
Congresos
Nombre del evento: VI Jornadas de Investigación del Grupo Montevideo
Institución organizadora: Asociación de Universidades del Grupo Montevideo , Argentina
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Productos Naturales
- 2007
Simposios
Nombre del evento: First Swedish-Hellenic Life Sciences Research Conference
Institución organizadora: National Hellenic Research Foundation-Örebro Life Science Center , Suecia
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de fármacos
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional
- 2007
Simposios
Nombre del evento: Second Swedish-Hellenic Life Sciences Research Conference
Institución organizadora: National Hellenic Research Foundation - Örebro Life Science Center , Grecia
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de fármacos
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional
- 2005
Simposios
Nombre del evento: The American Chemical Society Summer School on Green Chemistry
Institución organizadora: American Chemical Society-McGill University , Canadá
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Verde
- 2008
Talleres
Nombre del evento: Seminar on Environmental Technologies
Institución organizadora: Programa PACPYMES , Uruguay
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Biotecnología
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Producción de pulpa de celulosa
- 2005
Talleres
Nombre del evento: Workshop Internacional sobre Avances en Síntesis Orgánica, Dr. Benjamín J. Frydman
Institución organizadora: Sociedad Argentina de Investigación en Química Orgánica (SAIQO) , Argentina
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
- 1999
Talleres
Nombre del evento: Desafíos y soluciones en el descubrimiento del medicamento en América Latina. Técnicas computacionales en el descubrimiento de medicamentos
Institución organizadora: CYTED , Uruguay
Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química

	Orgánica / Diseño de fármacos Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Medicinal
2007	Encuentros <i>Nombre del evento:</i> Örebro Life Science Center Meetings <i>Institución organizadora:</i> Örebro Life Science Center , Suecia <i>Áreas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología
	Molecular Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica /
2007	Diseño de fármacos Encuentros <i>Nombre del evento:</i> Fifth European Chemical Computing Group User Group Meeting <i>Institución organizadora:</i> Chemical Computing Group , Alemania <i>Áreas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica /
1998	Diseño de fármacos Encuentros <i>Nombre del evento:</i> II Jornadas de Educación en la Facultad de Química <i>Institución organizadora:</i> Unidad Académica de Educación Química - Facultad de Química , Uruguay <i>Áreas del conocimiento:</i> Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Educación Universitaria

Construcción institucional

El desarrollo de nuevas líneas de investigación se considera un aporte importante a la construcción institucional, en particular la aplicación de la Química Computacional a la solución de problemas reales en el área de Salud Humana. He creado cursos de grado y posgrado, dando visibilidad y fortalecimiento al área en la que me desempeño. He integrado e integro comisiones y órganos en PEDECIBA y en Facultad de Química y actuado en tribunales de Tesis. Destaco la construcción de un centro de cálculo, que sustenta nuestro trabajo de investigación y que, conjuntamente con nuestra experiencia, se encuentra a disposición de otros.

Idiomas

Español

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

Inglés

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

Sueco

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

Áreas de actuación

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

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

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

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

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

Actuación Profesional

Cargos desempeñados actualmente

- Desde:* 11/2016
Área Química, Investigador Grado 4 , (40 horas semanales) , Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas , Uruguay
- Desde:* 12/2016
Prof. Agregado de Química Computacional , (Docente Grado 4 Titular, 40 horas semanales / Dedicación total) , Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay
- Desde:* 10/2016
Colaboración con Prof. Leif A. Eriksson , (5 horas semanales) , Goteborgs Universitet , Suecia
- Desde:* 04/2016
Consultor , (1 horas semanales) , Queen's University , Canadá

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

Vínculos con la institución

04/2002 - 04/2005, *Vínculo:* Becario de Doctorado, (40 horas semanales / Dedicación total)

10/1998 - 10/2000, *Vínculo:* Becaria de Maestría, (40 horas semanales / Dedicación total)

04/2008 - 11/2016, *Vínculo:* Área Química, Investigador Grado 3, (40 horas semanales)

11/2016 - Actual, *Vínculo:* **Área Química, Investigador Grado 4, (40 horas semanales)**

Actividades

03/2014 - Actual

Líneas de Investigación , Facultad de Química , DETEMA

Aplicación de estrategias computacionales al diseño de compuestos bioactivos y al estudio de sistemas biológicos y químicos , Coordinador o Responsable

04/2008 - 03/2014

Líneas de Investigación , Facultad de Química , Laboratorio de Síntesis Orgánica-Cátedra de Química Cuántica

Biosíntesis y degradación de lignina. Obtención de sustancias químicas útiles a partir de biomasa. , Coordinador o Responsable

04/2002 - 04/2005

Líneas de Investigación , Facultad de Química , Laboratorio de Síntesis Orgánica-Cátedra de Química Cuántica

Aspectos Físicoquímicos y Sintéticos de la Oligomerización de Ciclohexadienodiolos Quirales , Integrante del Equipo

10/1998 - 10/2001

Líneas de Investigación , Facultad de Química , Laboratorio de Síntesis Orgánica

Síntesis y Reactividad de N-óxido y N,N-dióxido de 1,2,4-triazinas. Estudio de la actividad biológica de derivados y su relación con la estructura , Integrante del Equipo

08/2014 - Actual

Docencia , Doctorado

Principios de Físicoquímica Molecular Aplicados a Sistemas Biológicos , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

08/2011 - 11/2013

Docencia , Doctorado

Profundización en Química Orgánica , Invitado , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

07/2008 - 07/2008

Docencia , Doctorado

Biocatálisis estereoselectiva. Aplicaciones en síntesis orgánica , Invitado , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

09/2010 - 11/2010

Extensión , PEDECIBA-Química

Divulgación Científica, Video: ¿Qué es Biocatálisis?

03/2009 - Actual

Gestión Académica , Facultad de Química , PEDECIBA-Área Química

Integrante de la Comisión de Posgrado (evaluación de ingreso de estudiantes de posgrado al programa)

02/2011 - 02/2015

Gestión Académica , Facultad de Química , PEDECIBA-QUÍMICA

Integrante del Consejo Científico del Área Química (delegado por los investigadores)

01/2001 - 01/2002

Gestión Académica , Facultad de Química , PEDECIBA-Área Química

Integrante del Consejo Científico (delegado por los estudiantes)

12/2000 - 08/2001

Gestión Académica , Facultad de Química , PEDECIBA-Área Química

Integrante de la Comisión Evaluadora de Becas de Maestría y Doctorado

06/2015 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , CCBG (DETEMA) - Cátedra de Bioquímica (BIOCLIN)

Diseño racional y síntesis enzimática de galactósidos con potencial actividad como inhibidores de galectinas , Coordinador o Responsable

06/2012 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Computational Chemistry and Biology Group (CCBG) - DETEMA

Nuevos blancos para nuevos antibióticos. Predicción de poli-farmacología de inhibidores de Sortasa A , Coordinador o Responsable

04/2008 - 03/2014

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Laboratorio de Síntesis Orgánica-Cátedra de Química Cuántica

Biosíntesis y degradación de lignina. Obtención de sustancias químicas útiles a partir de biomasa. , Coordinador o Responsable

04/2002 - 04/2005

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Laboratorio de Síntesis Orgánica-Cátedra de Química Cuántica

Aspectos Físicoquímicos y Sintéticos de la Oligomerización de Ciclohexadienodios Quirales , Integrante del Equipo

10/1998 - 10/2000

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

Síntesis y Reactividad de N-óxido y N,N-dióxido de 1,2,4-triazinas. Estudio de la actividad biológica de derivados y su relación con la estructura , Integrante del Equipo

Örebro Universitet , Suecia

Vínculos con la institución

01/2007 - 12/2007, *Vínculo:* Investigador-Posdoc-Profesor Asociado, (40 horas semanales / Dedicación total)

01/2008 - 12/2012, *Vínculo:* Investigador Asociado, (2 horas semanales)

Actividades

01/2007 - 12/2009

Líneas de Investigación , Biophysical and Theoretical Chemistry Group , Department of Natural Sciences

Lignin biosynthesis and degradation , Coordinador o Responsable

10/2007 - 12/2007

Docencia , Grado

Organisk Kemi (teórico y práctico como único responsable, equivalente a Química Orgánica 101 de Facultad de Química, UdelaR)

01/2007 - 12/2007

Pasantías , Biophysical and Theoretical Chemistry Group , Department of Natural Sciences

(1) Lignin Biosynthesis and degradation. (2) Wood chemistry in supercritical CO₂. Reactions involving formation of peroxycarbonic acid and lignin degradation in supercritical CO₂. (3) Design of new photodynamic drugs. Modeling of intercalation of furocoum

01/2007 - 12/2007

Servicio Técnico Especializado , Biophysical Chemistry , Department of Natural Sciences

Exploration of redox chemistry of quinones (bajo confidencialidad, proyecto realizado para EKA Chemicals, Suecia)

09/2007 - 09/2007

Extensión , Department of Natural Sciences , Örebro Universitet

European Research Friday 2007 (divulgación de la química al público en general)

01/2007 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Biophysical and Theoretical Chemistry Group , Department of Natural Sciences
Lignin Biosynthesis and degradation , Coordinador o Responsable

01/2007 - 12/2007

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Biophysical and Theoretical Chemistry Group , Department of Natural Sciences
Design of new photodynamic drugs. Modeling furocumarin intercalation in DNA , Integrante del Equipo

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

Vínculos con la institución

12/2007 - 09/2008, *Vínculo:* Asistente de Química Orgánica (DQO-DETEMA), Docente Grado 2 Titular, (36 horas semanales)

10/2001 - 12/2007, *Vínculo:* Asistente de Química Cuántica, Docente Grado 2 Interino, (20 horas semanales)

04/2004 - 12/2007, *Vínculo:* Asistente de Química Orgánica, Docente Grado 2 Titular, (24 horas semanales)

07/2001 - 03/2004, *Vínculo:* Asistente de Química Orgánica, Docente Grado 2 Interino, (20 horas semanales)

03/1998 - 06/2001, *Vínculo:* Ayudante de Química Orgánica, Docente Grado 1 Interino, (25 horas semanales)

09/1995 - 12/1998, *Vínculo:* Ayudante Honorario de Química Orgánica, Docente Grado 1 Interino, (6 horas semanales)

09/1994 - 09/1995, *Vínculo:* Aspirante a Ayudante Honorario de Química Org, Docente Grado 1 Interino, (6 horas semanales)

09/2008 - 11/2008, *Vínculo:* Asistente de Química Orgánica (DQO-DETEMA), Docente Grado 2 Titular, (40 horas semanales / Dedicación total)

11/2008 - 03/2014, *Vínculo:* Profesor Adjunto de Físicoquímica Orgánica, Docente Grado 3 Titular, (40 horas semanales / Dedicación total)

03/2014 - 12/2016, *Vínculo:* Profesor Adjunto de Química Computacional, Docente Grado 3 Titular, (40 horas semanales / Dedicación total)

12/2016 - Actual, Vínculo: Prof. Agregado de Química Computacional, Docente Grado 4 Titular, (40 horas semanales / Dedicación total)

Actividades

03/2014 - Actual

Líneas de Investigación , Facultad de Química , DETEMA

Aplicación de estrategias computacionales al diseño de compuestos bioactivos y al estudio de sistemas biológicos y químicos ,
Coordinador o Responsable

03/2009 - 03/2015

Líneas de Investigación , Facultad de Química , DETEMA

Estudio computacional de sistemas enzimáticos. , Coordinador o Responsable

02/2009 - 03/2015

Líneas de Investigación , Facultad de Química , DQO-DETEMA

Estudio de reacciones multicomponente y dominó: aplicaciones en síntesis orgánica . Coordinador o Responsable

02/2009 - 03/2014

Líneas de Investigación , Facultad de Química , Departamento de Química Orgánica

Síntesis de lignanos y estructuras relacionadas empleando organocatálisis y biocatálisis , Coordinador o Responsable

01/2007 - 03/2014

Líneas de Investigación , Facultad de Química , DQO-DETEMA

Biosíntesis y degradación de lignina. Obtención de sustancias químicas útiles a partir de biomasa. , Coordinador o Responsable

03/2002 - Actual

Docencia , Grado

Modelado Molecular , Responsable , Química

03/2009 - 07/2015

Docencia , Grado

Química de los Procesos Industriales , Invitado , Química

06/2008 - 12/2013

Docencia , Grado

Laboratorio Avanzado de Química Orgánica (Q.O. 201, Plan 2000) , Organizador/Coordinador , Química

03/2001 - 07/2013

Docencia , Grado

Química Orgánica 101 (plan 2000) , Responsable , Química

03/2001 - 07/2013

Docencia , Grado

Química Orgánica 103 (plan 2000) , Responsable , Química

06/2004 - 12/2010

Docencia , Grado

Fisicoquímica Molecular Básica (plan 2000) (responsable del curso desde 2009) , Responsable , Química

03/2002 - 08/2004

Docencia , Grado

Laboratorio de Química Orgánica II (curso dictado para Facultad de Ciencias) , Química

06/2003 - 12/2003

Docencia , Grado

Modelado Molecular II (plan 2000) , Química

09/1995 - 12/2001

Docencia , Grado

Química Orgánica II (laboratorio, Plan 1980)

09/1995 - 12/2001

Docencia , Grado

Química Orgánica III (laboratorio, Plan 1980)

08/2014 - Actual

Docencia , Doctorado

Nombre de la asignatura* Principios de Fisicoquímica Molecular Aplicados a Sistemas Biológicos , Responsable , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

08/2009 - 12/2013

Docencia , Doctorado

Síntesis orgánica mediante transformaciones enzimáticas (org 309) , Invitado , Doctorado en Química

08/2012 - 12/2012

Docencia , Doctorado

Mecanismos de reacciones orgánicas , Responsable

07/2008 - 07/2008

Docencia , Doctorado

Biotatálisis estereoselectiva. Aplicaciones en síntesis orgánica , Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

05/2014 - 05/2014

Extensión , Facultad de Química , DETEMA

Semana de la Ciencia y la Tecnología (Conferencia: Química en 3D). Divulgación en dos liceos (Colegio Crandon y Liceo N° 1 de La Paz)

02/2009 - 02/2009

Extensión , ANEP-CODICEN , Centros Regionales de Profesores (CERP), Colonia

Conferencia: 'Industria de Fabricación de Pulpa de Celulosa'

06/2000 - 10/2000

Extensión , Laboratorio de Química Orgánica-Departamento de Química Orgánica , Facultad de Química-UdelaR

Entrenamiento de la delegación uruguaya (estudiantes de secundaria) que participó de la 6a Olimpiada Iberoamericana de Química, Caracas, Venezuela, octubre de 2000. Único responsable del entrenamiento

03/2000 - 07/2000

Extensión , Laboratorio de Química Orgánica-Departamento de Química Orgánica , Facultad de Química-UdelaR
Entrenamiento de la delegación uruguaya (estudiantes de secundaria) que participó de la 32a Olimpiada Internacional de Química, Copenhagen, Dinamarca, julio de 2000. Único responsable del entrenamiento

03/2014 - Actual

Gestión Académica , Facultad de Química , DETEMA
Integrante Titular de la Comisión de Posgrado de Facultad de Química

03/2009 - Actual

Gestión Académica , Facultad de Química , DETEMA
Integrante titular por el orden docente de la Comisión de Dedicación Total

03/2014 - 10/2015

Gestión Académica , Facultad de Química , DETEMA
Integrante Suplente de la Asamblea del Claustro de Facultad de Química

08/2015 - 08/2015

Gestión Académica , Facultad de Ciencias , Instituto de Química Biológica
Integrante de Comisión Asesora en la solicitud de promoción de Stephanie Portillo

07/2014 - 08/2014

Gestión Académica , Facultad de Química , DETEMA
Integración de Tribunal para concurso de Méritos y Pruebas para la provisión de un cargo de Ayudante de Química y Bioquímica Computacional (Exp. N° 10112000034514)

02/2009 - 12/2013

Gestión Académica , Facultad de Química , Departamento de Química Orgánica
Editor Web del Departamento de Química Orgánica

06/2013 - 06/2013

Gestión Académica , Facultad de Química , DQO
Integrante de la Comisión Asesora de Méritos, llamado a aspirantes cargo Ayudante del DQO (Proyecto CSIC I+D) (Exp. N° 101120-001987-13)

07/2012 - 07/2012

Gestión Académica , Facultad de Química , DETEMA
Integrante de Comisión Asesora de Méritos, cuadro de interinatos Asistente (Exp. N° 101120-000899-12)

05/2012 - 06/2012

Gestión Académica , Facultad de Química , Departamento de Química Orgánica
Integrante de Comisión Asesora de Méritos, cargo de Asistente para el Departamento de Química del Litoral (Exp. N° 101160-002065-11)

05/2012 - 05/2012

Gestión Académica , Facultad de Química , DETMA
Integrante de Comisión Asesora de Méritos, cuadro de interinatos a cargos de Ayudante de Cálculo Numérico y Computación (Exp. N° 101120-000813-12)

11/2010 - 08/2011

Gestión Académica , Facultad de Química , DETEMA
Integrante de Tribunal de Ayudantías Honorarias del Grupo de Química y Biología computacional (Exp. N° 101120-002081-10)

06/2011 - 06/2011

Gestión Académica , Facultad de Química , Departamento de Química Orgánica
Integrante de Comisión Asesora de Méritos, cuadro de interinatos Ayudante

08/2008 - 03/2010

Gestión Académica , Facultad de Química , Departamento de Química Orgánica
Miembro titular de la Comisión de Promoción Docente

05/2009 - 05/2009

Gestión Académica , Facultad de Química , DETEMA
Integrante de Comisión Asesora de Méritos, cuadro de interinatos Ayudante del Grupo de Químico Física Computacional (Exp. N° 101120-001032-09)

11/2008 - 02/2009

Gestión Académica , Facultad de Química , Departamento de Química Orgánica
Integrante de Tribunal de Ayudantías Honorarias del DQO (Exp. Nº 101120-002025-08)

05/2005 - 12/2006

Gestión Académica , Facultad de Química , UdelaR
Miembro de la Comisión para la implementación de la propuesta y elaboración del perfil del cargo de coordinador de las actividades del Sitio Web, por el orden docente

02/2002 - 12/2006

Gestión Académica , Departamento de Química Orgánica , Facultad de Química-UdelaR
Miembro de la Comisión Directiva del Departamento de Química Orgánica, como representante de los Grados 1 y 2

03/2002 - 12/2004

Gestión Académica , Departamento de Química Orgánica , Facultad de Química-UdelaR
Integrante de la Comisión de Cursos de Posgrado del Departamento de Química Orgánica

03/1999 - 11/2000

Gestión Académica , Facultad de Química , UdelaR
Miembro de la Comisión de Magíster en Química por el Orden Estudiantil

03/2016 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , DETEMA/BIOCLIN
Diseño racional y síntesis enzimática de galactósidos con potencial actividad como inhibidores de galectinas , Integrante del Equipo

03/2016 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , DETEMA-BIOCLIN
Diseño racional y síntesis enzimática de galactósidos con potencial actividad como inhibidores de galectinas , Coordinador o Responsable

06/2012 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , DETEMA
Nuevos blancos para nuevos antibióticos. Predicción de poli-farmacología de inhibidores de Sortasa A , Coordinador o Responsable

09/2008 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , DETEMA
Aplicación de estrategias computacionales al diseño de compuestos bioactivos y al estudio de sistemas biológicos y químicos , Coordinador o Responsable

10/2013 - 09/2016

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , DETEMA
Estudio teórico de la resistencia a la insulina en la diabetes tipo II , Integrante del Equipo

03/2013 - 03/2015

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Departamento de Química Orgánica
Oligo-tetrahidrofuranos 2,5-disustituídos. Síntesis quimioenzimática y evaluación biológica , Integrante del Equipo

03/2013 - 03/2015

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Departamento de Química Orgánica
Síntesis enantioselectiva de derivados de ibogaina y evaluación preliminar de su perfil biológico como potenciales agentes anti-adictivos , Integrante del Equipo

03/2013 - 03/2015

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , DQO-DETEMA
Motivos recurrentes en productos bioactivos: síntesis, predicción del perfil de actividad biológica e identificación dbasada en el ligando de nuevos compuestos con actividad biológica definida , Coordinador o Responsable

03/2013 - 03/2015

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Departamento de Química Orgánica
Síntesis y evaluación a campo de (7R)-(+)-beta-sesquifelandreno, feromona sexual de la chinche de la soja, Piezodorus Guildinii (Westwood) , Integrante del Equipo

03/2011 - 03/2015

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Departamento de Química Orgánica
Recuperación de productos químicos de alto valor agregado a partir de lignina Kraft. Preparación de modelos de lignina y estructuras relacionadas con potencial sintético , Otros/Orientador

12/2010 - 12/2013

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Departamento de Química Orgánica
Catálisis en la síntesis de nucleósidos modificados. Preparación de Neplanocina A , Integrante del Equipo

12/2010 - 12/2012

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Departamento de Química Orgánica
Lignina Kraft como fuente renovable de productos químicos de alto valor agregado , Otros/Orientador

12/2010 - 12/2012

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , DETEMA
Estudio del movimiento del lazo flexible WPD de la proteína tirosina fosfatasa humana PTP1B y los factores que lo influyen ,
Otros/Consultor

07/2010 - 07/2011

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , DETEMA
Diseño computacional de reacciones multicomponente y dominó para la síntesis de productos naturales y farmacéuticos , Otros/Tutor del
becario

07/2010 - 07/2011

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Departamento de Química Orgánica
Modificación quimioenzimática de residuos forestoindustriales. Obtención de polifenoles con potencial actividad curtiente , Otros/Tutor de
la becaria

06/2009 - 03/2011

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Departamento de Química Orgánica
Employing Biotechnical Tools to Convert Lignin Waste into High Value Organic Chemicals for Leather Tanning in Uruguay (Lindbergh
Foundation) , Coordinador o Responsable

02/2009 - 12/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , DETEMA
Estudio del mecanismo de acción de dehaloperoxidasas , Otros/Orientadora de Tesis de la responsable del proyecto (codirección con el
Prof. Oscar N. Ventura)

07/2009 - 06/2010

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Departamento de Química Orgánica
Generación de diversidad a través de reacciones multicomponente y dominó. , Coordinador o Responsable

04/2007 - 07/2009

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Cátedra de Química Cuántica
Modelado molecular de la estructura de la lignina , Coordinador o Responsable

04/2007 - 07/2009

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Facultad de Química , Cátedra de Química Cuántica-Laboratorio de Síntesis Orgánica
Producción y extracción de sustancias químicas de alto valor agregado mediante oxidación de lignina en CO₂ supercrítico , Integrante del
Equipo

03/2000 - 12/2002

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Departamento de Química Orgánica , Laboratorio de Síntesis Orgánica
N-Óxido de 1,2,4-Triazina: Síntesis, Evaluación Antitumoral y de Capacidad de Formación de Radicales Libres , Coordinador o
Responsable

06/2000 - 06/2002

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Departamento de Química Orgánica
Incorporación de Innovaciones en materia de Enseñanza de Grado. Aplicación de Modelización Molecular en el curso de Química
Orgánica: talleres de química orgánica computacional , Integrante del Equipo

12/1997 - 12/2001

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Departamento de Química Orgánica
Síntesis de Derivados de los sistemas N₂-óxido de 1,2,5-oxadiazol, N₄-óxido de 1,2,4-triazina y N₁(N₂),N₄-dióxido de 1,2,4-triazina.
Evaluación in vivo como Potenciales Agentes Citotóxicos Selectivos en Tumores Sólidos , Integrante del Equipo

08/1997 - 12/1997

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Departamento de Química Orgánica
Diseño Racional y Síntesis de Agentes Herbicidas Potenciales. Derivados de N₁,N₄-Dióxido de 1,2,4-Triazinas , Integrante del Equipo

11/1994 - 12/1997

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Departamento de Química Orgánica

Usos de dihidrodihidroxiarenos quirales en síntesis orgánica , Integrante del Equipo

University of Iowa , University of Iowa , Estados Unidos

[Vínculos con la institución](#)

06/2005 - 09/2005, *Vínculo:* Pasantía de Investigación, (40 horas semanales / Dedicación total)

[Actividades](#)

06/2005 - 09/2005

Líneas de Investigación , Medicinal and Natural Products Chemistry, Center of Biocatalysis and Biopro , Pharmacy College

Uso de lipasas inmovilizadas en reacciones de oxidación , Integrante del Equipo

06/2005 - 09/2005

Pasantías , Medicinal and Natural Products Chemistry, Center of Biocatalysis and Biopro , Pharmacy College, University of Iowa

(1) Uso de lipasas inmovilizadas en la peroxidación de ácidos carboxílicos. (2) Biocatálisis mediante lipasas y sus aplicaciones en síntesis total. Tutor: Prof. Horacio F. Olivo

06/2005 - 09/2005

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Medicinal and Natural Products Chemistry, Center of Biocatalysis and Biopro , Pharmacy College

Uso de lipasas inmovilizadas en la peroxidación de ácidos carboxílicos , Integrante del Equipo

06/2005 - 09/2005

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Medicinal and Natural Products Chemistry, Center of Biocatalysis and Biopro , Pharmacy College

Biocatálisis mediante lipasas y sus aplicaciones en síntesis total , Integrante del Equipo

Facultad de Farmacia y Bioquímica , Argentina

[Vínculos con la institución](#)

08/2000 - 09/2000, *Vínculo:* Pasantía de Investigación, (40 horas semanales)

[Actividades](#)

08/2000 - 08/2000

Pasantías , Centro de Síntesis y estudios de nuevos compuestos antineoplásicos , Facultad de Farmacia y Bioquímica-Universidad de Buenos Aires

Estudios de Afinidad por el ADN de Compuestos Antitumorales. Tutor: Dra. Ana María Bruno

08/2000 - 09/2000

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Centro de Síntesis y estudios de nuevos compuestos antineoplásicos

Estudios de Afinidad por el ADN de Compuestos Antitumorales , Integrante del Equipo

Consejo Superior de Investigaciones Científicas , Consejo Superior de Investigaciones Científicas , España

[Vínculos con la institución](#)

01/1999 - 04/1999, *Vínculo:* Pasantía de Investigación, (40 horas semanales)

[Actividades](#)

01/1999 - 04/1999

Pasantías , Instituto de Química Médica , Consejo Superior de Investigaciones Científicas-Madrid

Síntesis de Nuevos Fármacos Colinérgicos Derivados de Imidazoles 1,4-disustituídos. Tutor: Dra. Ana Martínez Gil

01/1999 - 04/1999

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Instituto de Química Médica - Madrid , Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)

Síntesis de Nuevos Fármacos Anticolinérgicos Derivados de imidazoles 1,4-disustituídos , Integrante del Equipo

Universidad Nacional de Quilmes , Argentina

[Vínculos con la institución](#)

05/2009 - 05/2009, *Vínculo:* Profesor invitado en curso de posgrado, (40 horas semanales)

[Actividades](#)

05/2009 - 05/2009

Docencia , Doctorado

Biocatálisis Asimétrica. Aplicaciones en síntesis orgánica / 30 hs sem. / Teórico , Invitado , Doctorado en Química

Institut Pasteur de Montevideo , Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay

[Vínculos con la institución](#)

02/2010 - 03/2010, *Vínculo:* Profesor invitado en curso de posgrado, (2 horas semanales)

[Actividades](#)

02/2010 - 03/2010

Docencia , Doctorado

DFT (Density Functional Theory) and chemical reactivity , Invitado , AMSUD Pasteur

National University of Ireland, Galway , Irlanda

[Vínculos con la institución](#)

04/2010 - 07/2010, *Vínculo:* , (40 horas semanales)

07/2010 - 12/2012, *Vínculo:* Investigador Asociado, (2 horas semanales)

[Actividades](#)

04/2010 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Biophysical and Theoretical Chemistry Group , Department of Chemistry
Design of inhibitors of CYP26 enzymes , Integrante del Equipo

Goteborgs Universitet , Suecia

[Vínculos con la institución](#)

01/2013 - 03/2013, *Vínculo:* , (40 horas semanales)

01/2013 - 09/2015, *Vínculo:* Investigador Asociado, (2 horas semanales)

[10/2015 - 09/2016](#), *Vínculo:* [EU researcher \(Marie Curie fellow\)](#), (40 horas semanales)

10/2016 - Actual, *Vínculo:* Colaboración con Prof. Leif A. Eriksson, (5 horas semanales)

[Actividades](#)

03/2016 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , University of Gothenburg , Department of Chemistry and Molecular Biology
Modeling of NSP6 (membrane protein of coronavirus) and computational design of inhibitors as potential antiviral compounds , Integrante del Equipo

01/2016 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , University of Gothenburg , Department of Chemistry and Molecular Biology
Computational and experimental design of food additives for celiacs , Integrante del Equipo

10/2015 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , University of Gothenburg , Department of Chemistry and Molecular Biology
Inhibiting Pseudomonas aeruginosa: a multidrug resistant pathogen , Coordinador o Responsable

01/2013 - Actual

Proyectos de Investigación y Desarrollo , Department of Chemistry and Molecular Biology
Nuevos blancos para nuevos antibióticos. Predicción de poli-farmacología de inhibidores de Sortasa A , Coordinador o Responsable

Queen's University , Canadá

[Vínculos con la institución](#)

04/2016 - Actual, *Vínculo:* Consultor, (1 horas semanales)

[Lineas de investigación](#)

Título: Aplicación de estrategias computacionales al diseño de compuestos bioactivos y al estudio de sistemas biológicos y químicos

Tipo de participación: Coordinador o Responsable

Equipos: Leif A. Eriksson(Integrante); Eduardo Bermúdez(Integrante); Diana Cecilia Porciúncula(Integrante)

Palabras clave: Diseño computacional de fármacos; Biología computacional

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

Título: Aplicación de estrategias computacionales al diseño de compuestos bioactivos y al estudio de sistemas biológicos y químicos

Tipo de participación: Coordinador o Responsable

Objetivo: Línea principal de investigación

Equipos: Eduardo Bermúdez(Integrante); Cecilia Porciúncula(Integrante)

Palabras clave: Diseño computacional de fármacos; Biología computacional

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

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

Título: Aspectos Físicoquímicos y Sintéticos de la Oligomerización de Ciclohexadienodios Quirales

Tipo de participación: Integrante del Equipo

Objetivo: Tesis de Doctorado desarrollada en el tema

Equipos: Gustavo Seoane(Integrante); Oscar N. Ventura(Integrante)

Palabras clave: Ciclitoles; Mecanismos de Reacción; Síntesis orgánica; Teoría de Funcionales de la Densidad; Ácidos de Lewis

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

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

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

Título: Biosíntesis y degradación de lignina. Obtención de sustancias químicas útiles a partir de biomasa.

Tipo de participación: Coordinador o Responsable

Objetivo: La materia constitutiva de los vegetales o biomasa, y en particular la lignina, constituye una materia prima reciclable que puede explotarse sin agotar los recursos del planeta. Sin embargo, actualmente no se está explotando todo su potencial. Esto enfatiza la necesidad de desarrollar nuevos procesos ambientalmente amigables, que permitan convertir la vasta fuente de lignina en productos útiles, como ser polímeros, precursores sintéticos y aditivos empleados en las industrias farmacéutica y alimentaria. Esta línea de investigación se concentra en la utilización de oxidaciones químicas (frecuentemente organocatalizadas) y oxidaciones enzimáticas para 'refinar' la lignina, una materia prima de bajo valor, y transformarla en productos químicos de alto valor agregado. La aplicación de Química Computacional permite estudiar la estructura de la lignina, conocer sus particularidades conformacionales y sus características químicas. El acceso a tal tipo de información asiste en el diseño de las tecnologías que permiten la modificación controlada de la biomasa lignocelulósica en los productos deseados. En el marco de esta línea de investigación dirigida por la postulante se han iniciado dos tesis de posgrado (Lic. Virginia Aldabalde e I.Q. Mariela Risso), se ha obtenido financiación por parte de agencias nacionales e internacionales y hay un aporte importante a la formación de recursos humanos de grado (iniciación a la investigación).

Equipos: Gustavo Seoane(Integrante); Oscar N. Ventura(Integrante); Leif A. Eriksson(Integrante); Mariela Risso(Integrante); Virginia Aldabalde(Integrante); Daniela Gamenara(Integrante); Eduardo Bermúdez(Integrante)

Palabras clave: Química de la madera; Lignina; Productos químicos de alto valor agregado; Química Computacional; Bioinformática Estructural; Biotecnología

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

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

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

Título: Biosíntesis y degradación de lignina. Obtención de sustancias químicas útiles a partir de biomasa.

Tipo de participación: Coordinador o Responsable

Objetivo: La materia constitutiva de los vegetales o biomasa, y en particular la lignina, constituye una materia prima reciclable que puede explotarse sin agotar los recursos del planeta. Sin embargo, actualmente no se está explotando todo su potencial. Esto enfatiza la necesidad de desarrollar nuevos procesos ambientalmente amigables, que permitan convertir la vasta fuente de lignina en productos útiles, como ser polímeros, precursores sintéticos y aditivos empleados en las industrias farmacéutica y alimentaria. Esta línea de investigación se concentra en la utilización de oxidaciones químicas (frecuentemente organocatalizadas) y oxidaciones enzimáticas para 'refinar' la lignina, una materia prima de bajo valor, y transformarla en productos químicos de alto valor agregado. La aplicación de Química Computacional permite estudiar la estructura de la lignina, conocer sus particularidades conformacionales y sus características químicas. El acceso a tal tipo de información asiste en el diseño de las tecnologías que permiten la modificación controlada de la biomasa lignocelulósica en los productos deseados. En el marco de esta línea de investigación dirigida por la postulante se ha iniciado una tesis de posgrado (Lic. Virginia Aldabalde), se ha obtenido financiación por parte de agencias nacionales e internacionales y hay un aporte importante a la formación de recursos humanos de grado (iniciación a la investigación).

Equipos: Gustavo Seoane(Integrante); Oscar N. Ventura(Integrante); Virginia Aldabalde(Integrante); María Lucía Derrudi(Integrante); Daniela Gamenara(Integrante)

Palabras clave: Química de la madera; Lignina; Productos químicos de alto valor agregado; Biotecnología; Química Computacional

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

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

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

Título: Estudio computacional de sistemas enzimáticos.

Tipo de participación: Coordinador o Responsable

Objetivo: Orientación de la Lic. Fiorentina Bottinelli (Tesis de Doctorado en Química), al Bach. Gastón Pais (Tesis de Licenciatura en Química) y a la Dra. Maitia Labora (Trabajo Final, Practicantado, de la carrera de Química Farmacéutica)

Equipos: Oscar N. Ventura(Integrante); Fiorentina Bottinelli(Integrante); Gastón Pais(Integrante)

Palabras clave: Tubulina; Proteína FTO; peroxidasa

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

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

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

Bioinformática Estructural

Título: Estudio de reacciones multicomponente y dominó: aplicaciones en síntesis orgánica

Tipo de participación: Coordinador o Responsable

Objetivo: Orientación del Bach. Eduardo Bermúdez en su trabajo de iniciación en Química (BECA ANII) y en el trabajo final (practicantado) para aspirar al título de Químico. Orientación de Geeske Gratzel (Alemania) en su trabajo final de carrera (pasantía en el exterior)

Equipos: Federico Geymonat(Integrante); Eduardo Bermúdez(Integrante); Geeske Gratzel(Integrante)

Palabras clave: Reacciones Multicomponente; Reacciones Dominó; Organocatálisis

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

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

Química Computacional

Título: Lignin biosynthesis and degradation

Tipo de participación: Coordinador o Responsable

Objetivo: Tema desarrollado en cooperación con la Universidad de Örebro (Prof. Leif A. Eriksson)

Equipos: Oscar N. Ventura(Integrante); Leif A. Eriksson(Integrante)

Palabras clave: Lignina; Química de la madera; Química Computacional

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

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

Título: Síntesis de lignanos y estructuras relacionadas empleando organocatálisis y biocatálisis

Tipo de participación: Coordinador o Responsable

Objetivo: Esta línea de investigación se enmarca dentro de la línea maestra de investigación en química de la madera. Sin embargo, resulta una ramificación necesaria y muy interesante. El objetivo es la síntesis de productos con valor agregado (como bloques de construcción o por su potencial actividad biológica), relacionados estructuralmente con la lignina, aplicando organocatálisis y biocatálisis. En el marco de esta línea donde la postulante es la responsable, se inició en 2009 una tesis de posgrado (I.Q. Mariela Risso), hay un aporte importante a la formación de recursos humanos de grado (iniciación a la investigación) tanto en química orgánica como química computacional.

Equipos: Gustavo Seoane(Integrante); Mariela Risso(Integrante); María Lucía Derrudi(Integrante); Daniela Gamenara(Integrante); Federico Geymonat(Integrante); Eduardo Bermúdez(Integrante); Camila Lacroze(Integrante)

Palabras clave: Lignanos; Biocatálisis; Organocatálisis

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Organocatálisis y Biocatálisis

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

Química Computacional

Título: Síntesis y Reactividad de N-óxido y N,N-dióxido de 1,2,4-triazinas. Estudio de la actividad biológica de derivados y su relación con la estructura

Tipo de participación: Integrante del Equipo

Objetivo: Tesis de Maestría desarrollada en el tema.

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

Palabras clave: Síntesis orgánica; Química Computacional; Química Medicinal

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

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

Título: Uso de lipasas inmovilizadas en reacciones de oxidación

Tipo de participación: Integrante del Equipo

Equipos: Horacio F. Olivo(Integrante)

Palabras clave: Síntesis orgánica; Biocatálisis

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Biotransformaciones
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica

Proyectos

2008 - Actual

Título: Aplicación de estrategias computacionales al diseño de compuestos bioactivos y al estudio de sistemas biológicos y químicos, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Proyecto de Dedicación Total. Apoyo financiero por parte de la UdeLaR (partida anual de Dedicación Total)

Tipo: Investigación

Alumnos: 2(Doctorado)

Equipo: Eduardo Bermúdez(Integrante); Diana Cecilia Porciúncula González(Integrante)

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

Palabras clave: Química Computacional

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

Biología Computacional

2016 - Actual

Título: Computational and experimental design of food additives for celiacs, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Se han diseñado aditivos seguros para celíacos, se han ensayado experimentalmente y se han obtenido excelentes resultados. Este trabajo surge como una colaboración establecida entre la suscrita e investigadores de Chalmers University of Technology (otra universidad en Gotemburgo)

Tipo: Investigación

Alumnos:

Equipo: Nathalie Scheers(Responsable); Johan Scheers(Integrante); Niklas Engström(Integrante)

Financiadores: Chalmers University of Technology Gothenburg Sweden / Apoyo financiero

Gothenburg University / Apoyo financiero

Palabras clave: Celiac disease; Food additives

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

2010 - Actual

Título: Design of inhibitors of CYP26 enzymes, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo,

Tipo: Investigación

Alumnos:

Equipo: Leif A. Eriksson(Responsable); Patricia Saenz Méndez(Integrante)

Financiadores: Institución del exterior / National University of Ireland, Galway / Cooperación

Palabras clave: P450 cytochrome; Enzyme mechanism

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

2015 - Actual

Título: Diseño racional y síntesis enzimática de galactósidos con potencial actividad como inhibidores de galectinas, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Estudiante de Doctorado: Cecilia Porciúncula Co-dirección: Dra. Cecilia Giacomini y Dra. Gabriela Irazoqui Las interacciones proteína-carbohidrato están involucradas en una amplia variedad de procesos biológicos. Los carbohidratos que componen glicoproteínas y glicolípidos interactúan en forma específica con proteínas que poseen un dominio de reconocimiento para carbohidratos denominadas lectinas. La profundización en la comprensión de estas interacciones es fundamental tanto para el estudio de determinadas patologías, como para el diseño de fármacos con aplicaciones terapéuticas. La galectina-1, que reconoce en forma específica b-galactósidos, es secretada por la mayoría de los tumores malignos y se asocia al desarrollo de procesos cancerígenos. Esto la convierte en un blanco prometedor para la terapia contra el cáncer y a sus inhibidores en potenciales agentes antitumorales. El uso de herramientas computacionales para el estudio de las interacciones de la galectina-1 con potenciales ligandos es un poderoso insumo para el diseño de inhibidores. Por otra parte las glicosidasas constituyen una excelente alternativa para la síntesis de glicósidos, ya que su estereoselectividad permite la obtención de compuestos anómicamente puros en un solo paso de reacción en condiciones ambientalmente amigables. En esta tesis se propone un trabajo interdisciplinario que combina herramientas computacionales y enzimáticas, que permitan el diseño racional y síntesis de glicósidos con actividad como inhibidores de galectinas. Esta estrategia permitiría generar potenciales fármacos antitumorales contribuyendo a la lucha contra el cáncer. Se realizará el estudio in silico de la interacción galectina-1 con diferentes ligandos: Gal-b-(1-X)-Glc-b-(1-4)-Glc y Gal-b-(1-X)-GlcNAc-b-(1-4) GlcNAc (trisacáridos) y los galactósidos galactosil-tirosina y galactosil-dopamina. De manera complementaria se evaluará la síntesis enzimática de los ligandos propuestos mediante el sistema de transglicosilación catalizado por la beta

galactosidasa de *Aspergillus oryzae*. Se utilizará lactosa como dador de grupo galactosilo, y celobiosa, quitobiosa, tirosina y dopamina como aceptores. Se seleccionará aquel ligando que presente mejor afinidad por galectina-1 y cuya síntesis enzimática sea factible, procediéndose a su síntesis, purificación, elucidación estructural y evaluación biológica.

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Doctorado)

Equipo: Diana Cecilia Porciúncula González(Integrante); Cecilia Ines Giacomini Viera(Integrante); Maria Gabriela Irazoqui Duñach(Integrante)

Financiadores: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Facultad de Química - UDeLaR / Remuneración

Palabras clave: Galectinas; Síntesis enzimática; Diseño computacional de inhibidores

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

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

2016 - Actual

Título: Diseño racional y síntesis enzimática de galactósidos con potencial actividad como inhibidores de galectinas, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Beca de Doctorado ANII para Cecilia Porciúncula Co-Dirección: Dra. Cecilia Giacomini y Dra. Gabriela Irazoqui

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Doctorado)

Equipo: Cecilia Porciúncula(Integrante); Cecilia Giacomini(Responsable); Gabriela, Irazoqui(Integrante)

Financiadores: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

Palabras clave: Galectinas; Antitumorales; Química Computacional; Síntesis enzimática

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

2016 - Actual

Título: Diseño racional y síntesis enzimática de galactósidos con potencial actividad como inhibidores de galectinas, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Proyecto de iniciación CSIC (Responsable: Cecilia Porciúncula, ID 99). Rol como tutor de posgrado de la responsable. Co-tutoras: Dra. Cecilia Giacomini y Dra. Gabriela Irazoqui

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Doctorado)

Equipo: Cecilia Giacomini(Integrante); Gabriela Irazoqui(Integrante)

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

Palabras clave: Galectinas

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

2015 - Actual

Título: Inhibiting *Pseudomonas aeruginosa*: a multidrug resistant pathogen, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Proyecto Financiado por la Unión Europea (FP7/Marie Curie), Västra Götaland Regionen y Universidad de Gotemburgo.

Tipo: Investigación

Alumnos:

Equipo: Leif A. Eriksson(Integrante)

Financiadores: Universidad de Gotemburgo / Apoyo financiero

Västra Götalands Regionen / Apoyo financiero

European Commission - Marie Curie / Apoyo financiero

Palabras clave: Antibiotics; Resistant pathogens; Computational Chemistry

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

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

2007 - Actual

Título: Lignin Biosynthesis and degradation, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Proyecto desarrollado en cooperación con la Universidad de Örebro (Prof. Leif A. Eriksson). Apoyo financiero (Örebro University) mediante acceso libre al sistema de supercomputadoras sueco. La cooperación con el Advanced Biomedical Computing Center-National Cancer Institute permite el acceso libre a las supercomputadoras y biblioteca del National Cancer Institute

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Especialización),

Equipo: Oscar N. Ventura(Integrante); Leif A. Eriksson(Integrante)

Financiadores: Institución del exterior / Örebro Universitet / Apoyo financiero

Palabras clave: Lignina; Química de la madera; Química Computacional

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

2016 - Actual

Título: Modeling of NSP6 (membrane protein of coronavirus) and computational design of inhibitors as potential antiviral compounds, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* No se encuentra cristalizada la estructura de la proteína de membrana NSP6, una proteína de coronavirus, que se relaciona con su virulencia. Inhibirla permitirá generar potenciales antivirales. La suscrita ha desarrollado un modelo computacional de la proteína NSP6, que se está refinando actualmente, para luego proceder a realizar un screening virtual con el objetivo de encontrar potenciales inhibidores.

Tipo: Investigación

Alumnos:

Equipo: Leif A. Eriksson(Integrante); Ana Lundin(Responsable); Edward Trybala(Integrante); Tomas Bergström(Integrante)

Financiadores: Gothenburg University / Apoyo financiero

Palabras clave: Virology; Membrane proteins; Antiviral drugs

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

2012 - Actual

Título: Nuevos blancos para nuevos antibióticos. Predicción de poli-farmacología de inhibidores de Sortasa A, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Estudiante de Doctorado: Eduardo Bermúdez Co-dirección: Leif A. Eriksson Evitar la resistencia generada a los antibióticos sigue siendo un objetivo importante de investigación en química medicinal. Al mismo tiempo, el desarrollo de fármacos selectivos (i.e. fármacos que no desplieguen efectos secundarios no-deseados) es también un desafío fundamental para la comunidad científica. Sortasa A (SrtA) es una enzima esencial para la elevada patogenicidad de las bacterias Gram-positivas, frecuentemente responsables de listeriosis, neumonía e infecciones oportunistas. Así, el descubrimiento de inhibidores de SrtA selectivos (no-tóxicos) se encuentra en la vanguardia de la investigación en química medicinal. En este trabajo, se desarrollarán pequeñas moléculas activas contra SrtA. Adicionalmente, se emplearán aproximaciones de docking inverso de forma de identificar receptores humanos para esos potenciales antibióticos y así detectar posibles efectos adversos no-deseados. Finalmente, se realizarán estudios de relación estructura-actividad con aquellos compuestos activos contra SrtA, que al mismo tiempo demuestren que no se unen a enzimas humanas.

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Doctorado)

Equipo: Leif A. Eriksson(Integrante)

Financiadores: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

Facultad de Química - UDeLaR / Remuneración

Universidad de Gotemburgo / Cooperación

Palabras clave: Diseño de antibióticos; Química Computacional

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

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

2012 - Actual

Título: Nuevos blancos para nuevos antibióticos. Predicción de poli-farmacología de inhibidores de Sortasa A, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Beca de Maestría y Doctorado ANII para Eduardo Bermúdez

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Maestría/Magister),

Equipo: Leif A. Eriksson(Integrante); Eduardo Bermúdez(Integrante)

Financiadores: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Palabras clave: Sortasa A; Antibióticos; Poli-farmacología

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

2013 - Actual

Título: Nuevos blancos para nuevos antibióticos. Predicción de poli-farmacología de inhibidores de Sortasa A, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Proyecto de investigación en el que se desarrolla la Tesis de Posgrado de Eduardo Bermúdez, dirigida por la postulante y co-dirigida por el Prof. Leif A. Eriksson

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Maestría/Magister),

Equipo: Leif A. Eriksson(Integrante); Eduardo Bermúdez(Integrante)

Financiadores: Goteborgs Universitet / Cooperación

Palabras clave: Sortasa A; Antibióticos; Docking Inverso; Poli-farmacología

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

1997 - 1997

Título: Diseño Racional y Síntesis de Agentes Herbicidas Potenciales. Derivados de N1,N4-Dióxido de 1,2,4-Triazinas, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo,

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Pregrado),

Equipo: Hugo Cerecetto(Responsable); Mercedes González(Responsable)

Financiadores: Otra institución nacional / Consejo Nacional de Innovación Ciencia y Tecnología y BID / Apoyo financiero

Consejo Nacional de Innovación Ciencia y Tecnología y B I D / Beca

Palabras clave: Herbicidas

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de compuestos con actividad

biológica

1994 - 1997

Título: Usos de dihidrodihidroxiarenos quirales en síntesis orgánica, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo,

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Pregrado),

Equipo: Gustavo Seoane(Responsable)

Financiadores: Otra institución nacional / Consejo Nacional de Innovación Ciencia y Tecnología y BID / Apoyo financiero

Consejo Nacional de Innovación Ciencia y Tecnología y B I D / Beca

Palabras clave: Síntesis enantioselectiva

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

1999 - 1999

Título: Síntesis de Nuevos Fármacos Anticolinérgicos Derivados de imidazoles 1,4-disustituídos, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo,

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Maestría/Magister),

Equipo: Ana Martínez Gil(Responsable); Ana Castro(Responsable)

Financiadores: Institución del exterior / Consejo Superior de Investigaciones Científicas / Apoyo financiero

Consejo Superior de Investigaciones Científicas / Cooperación

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Beca

Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Beca

Palabras clave: Síntesis orgánica; Fármacos anticolinérgicos

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

2000 - 2000

Título: Estudios de Afinidad por el ADN de Compuestos Antitumorales, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo,

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Maestría/Magister),

Equipo: Ana María Bruno(Responsable)

Financiadores: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Beca

Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero

Palabras clave: ADN; Intercalación

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

1998 - 2000

Título: Síntesis y Reactividad de N-óxido y N,N-dióxido de 1,2,4-triazinas. Estudio de la actividad biológica de derivados y su relación con la estructura, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo,

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Maestría/Magister),

Equipo: Hugo Cerecetto(Responsable); Mercedes González(Responsable)

Financiadores: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Beca

Palabras clave: Síntesis orgánica; Química Computacional; Química Medicinal

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

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

1997 - 2001

Título: Síntesis de Derivados de los sistemas N2-óxido de 1,2,5-oxadiazol, N4-óxido de 1,2,4-triazina y N1(N2),N4-dióxido de 1,2,4-triazina. Evaluación in vivo como Potenciales Agentes Citotóxicos Selectivos en Tumores Sólidos, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo,

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Especialización),

Equipo: Hugo Cerecetto(Responsable)

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

Comisión Honoraria de Lucha Contra el Cáncer / Beca

Palabras clave: Agentes Citotóxicos; Tumores Sólidos

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

2000 - 2002

Título: Incorporación de Innovaciones en materia de Enseñanza de Grado. Aplicación de Modelización Molecular en el curso de Química Orgánica: talleres de química orgánica computacional, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* Proyecto financiado por la Comisión Sectorial de Enseñanza. La suscrita fue responsable de la elaboración de los ejercicios de Modelado Molecular y del dictado de las clases correspondientes.

Tipo: Investigación

Alumnos:

Equipo: Gustavo Seoane(Responsable); Hugo Cerecetto(Integrante); Mercedes González(Integrante); Marina Miguez(Integrante); Patricia Saenz Méndez(Integrante)

Financiadores: Otra institución nacional / Universidad de la República. Comisión Sectorial de Enseñanza / Apoyo financiero

Comisión Sectorial de Enseñanza - UDeLaR / Remuneración

Palabras clave: Modelado Molecular; Química Orgánica

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Educación Universitaria

2000 - 2002

Título: N-Óxido de 1,2,4-Triazina: Síntesis, Evaluación Antitumoral y de Capacidad de Formación de Radicales Libres, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* PROYECTO FINANCIADO. CSIC Iniciación Responsable Científico: Patricia Saenz Méndez - Mariela Rizzo

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Maestría/Magister), 1(Especialización),

Equipo: Hugo Cerecetto(Integrante); Mercedes González(Integrante); Mariela Rizzo(Integrante); Patricia Saenz Méndez(Responsable)

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

Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Remuneración

Palabras clave: Compuestos heterocíclicos; Actividad antitumoral

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de fármacos

2002 - 2005

Título: Aspectos Físicoquímicos y Sintéticos de la Oligomerización de Ciclohexadienodios Quirales, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo,

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Doctorado)

Equipo: Gustavo Seoane(Responsable); Oscar N. Ventura(Responsable); Patricia Saenz Méndez(Responsable)

Financiadores: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Beca

Palabras clave: Síntesis orgánica; Química Computacional; Teoría de Funcionales de la Densidad; Ácidos de Lewis

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

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

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

2005 - 2005

Título: Biocatálisis mediante lipasas y sus aplicaciones en síntesis total, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo,

Tipo: Investigación

Alumnos: 2(Doctorado)

Equipo: Horacio F. Olivo(Responsable)

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

University of Iowa / Apoyo financiero

Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Beca

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Palabras clave: Síntesis orgánica; Síntesis enantioselectiva; Biocatálisis

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

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

2005 - 2005

Título: Uso de lipasas inmovilizadas en la peroxidación de ácidos carboxílicos, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo,

Tipo: Investigación

Alumnos: 2(Doctorado)

Equipo: Horacio F. Olivo(Responsable)

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

University of Iowa / Apoyo financiero

Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Beca

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Palabras clave: Síntesis orgánica; Biocatálisis

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

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

2007 - 2007

Título: Design of new photodynamic drugs. Modeling furocumarin intercalation in DNA, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo,
Descripción: El estudio de la interacción de moléculas pequeñas con el ADN es esencial para el diseño racional de compuestos que posean la actividad farmacológica deseada. Dentro de un programa de investigación dirigido al desarrollo de nuevos fármacos para terapia fotodinámica, en este proyecto nos concentramos en las furocumarinas. Estos compuestos se intercalan en el ADN y luego de absorber un fotón UVA forman aductos covalentes con el ADN. Tales compuestos han sido utilizados en terapia fotodinámica. En el presente trabajo se ha estudiado el mecanismo de acción a nivel molecular, empleando técnicas de docking, con el objetivo de diseñar fármacos más activos y que presenten menores efectos secundarios no deseados.

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Especialización),

Equipo: Leif A. Eriksson(Responsable)

Financiadores: Institución del exterior / Örebro University / Apoyo financiero

Institución del exterior / Örebro Universitet / Remuneración

Palabras clave: ADN; Terapia fotodinámica; Intercalación

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de fármacos

2007 - 2009

Título: Modelado molecular de la estructura de la lignina, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* FINANCIADO (PDT) La lignina es un heteropolímero natural con una estructura tridimensional compleja y aparentemente al azar. Si estructura no ha sido totalmente elucidada, entre otras razones, porque al ser insoluble en la mayoría de los disolventes (con excepción de algunos líquidos iónicos), no se puede extraerla sin modificarla. Conocer la estructura de la lignina asistirá en el desarrollo de las tecnologías que permiten transformar la biomasa lignocelulósica en productos de alto valor agregado. El proyecto implica el estudio computacional de la biosíntesis de la lignina. Los objetivos del proyecto son: 1) Determinar los factores que influyen en el proceso de formación de lignina 2) Explicar las abundancias relativas de los diferentes tipos de enlace observados en la lignina natural 3) Estudiar las particularidades conformacionales del polímero

Tipo: Investigación

Alumnos:

Equipo: Oscar N. Ventura(Integrante); Leif A. Eriksson(Integrante); Raúl E. Cachau(Integrante)

Financiadores: DINACYT/DICYT/CONICYT / Apoyo financiero

Institución del exterior / Örebro Universitet / Cooperación

Palabras clave: Química de la madera; Lignina; Química Computacional

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

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

2007 - 2009

Título: Producción y extracción de sustancias químicas de alto valor agregado mediante oxidación de lignina en CO₂ supercrítico, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* FINANCIADO El objetivo del proyecto es estudiar desde el punto de vista computacional y experimental la producción de sustancias químicas de alto valor agregado mediante oxidación en fluidos supercríticos.

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Pregrado),

Equipo: Oscar N. Ventura(Responsable); Virginia Aldabalde(Integrante); Patricia Saenz Méndez(Integrante); David González(Integrante); Iván Jachmanian(Integrante)

Financiadores: DINACYT/DICYT/CONICYT / Apoyo financiero

Palabras clave: Lignina; Química de la madera; Química Computacional; Productos químicos de alto valor agregado

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

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

2009 - 2010

Título: Estudio del mecanismo de acción de dehaloperoxidasas, *Tipo de participación:* Otros/Orientadora de Tesis de la responsable del proyecto (codirección con el Prof. Oscar N. Ventura), *Descripción:* FINANCIADO (FCE) Proyecto FCE, Modalidad III, Proyecto de Tesis. Responsable: Fiorentina Bottinelli (FCE_2007_272)

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Doctorado)

Equipo: Oscar N. Ventura(Integrante); Patricia Saenz Méndez(Integrante); Fiorentina Bottinelli(Responsable)

Financiadores: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero

Palabras clave: Dehaloperoxidasas; Mecanismos enzimáticos; Química Computacional

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

2009 - 2010

Título: Generación de diversidad a través de reacciones multicomponente y dominó., *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable,

Tipo: Investigación

Alumnos: 3(Pregrado), 2(Maestría/Magister),

Equipo: Mariela Risso(Integrante); María Lucia Derrudi(Integrante); Patricia Saenz Méndez(Responsable); Federico Geymonat(Integrante); Geeske Gratzel(Integrante)

Financiadores: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Palabras clave: Reacciones Dominó; Reacciones Multicomponente; Organocatálisis

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

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

2010 - 2011

Título: Diseño computacional de reacciones multicomponente y dominó para la síntesis de productos naturales y farmacéuticos, *Tipo de participación:* Otros/Tutor del becario, *Descripción:* Beca de Iniciación ANII para Eduardo Bermúdez (BE_INI_2010_2054)

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Pregrado),

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

Financiadores: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

Palabras clave: Reacciones Multicomponente; Reacciones Dominó; Química Computacional

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

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

2009 - 2011

Título: Employing Biotechnical Tools to Convert Lignin Waste into High Value Organic Chemicals for Leather Tanning in Uruguay (Lindbergh Foundation), *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* Proyecto Financiado. Comienzo de la financiación julio de 2009. Uno de los ocho (8) proyectos seleccionados en el mundo (entre más de 130 presentados) para ser financiado. Sitio web: <http://www.lindberghfoundation.org/2009-funded-grant-projects/saenz-mendez-dr.-patricia.html>

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Maestría/Magister), 2(Especialización),

Equipo: Gustavo Seoane(Integrante); Virginia Aldabalde(Integrante); María Lucía Derrudi(Integrante); Daniela Gamenara(Integrante); Federico Geymonat(Integrante)

Financiadores: Institución del exterior / Lindbergh Foundation / Apoyo financiero

Palabras clave: Biotecnología; Lignina; Química de la madera; Curtido de cueros; Celulosa

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis de polifenoles

2010 - 2011

Título: Modificación quimioenzimática de residuos forestoindustriales. Obtención de polifenoles con potencial actividad curtiente, *Tipo de participación:* Otros/Tutor de la becaria, *Descripción:* Beca de Iniciación ANII para María Lucía Derrudi. (BE_INI_2010_2107)

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Pregrado),

Equipo: María Lucía Derrudi(Responsable); Patricia Saenz Méndez(Integrante)

Financiadores: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

Palabras clave: Lignina; Residuos forestales; Biocatálisis

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

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

2010 - 2012

Título: Estudio del movimiento del lazo flexible WPD de la proteína tirosina fosfatasa humana PTP1B y los factores que lo influyen, *Tipo de participación:* Otros/Consultor, *Descripción:* Proyecto Modalidad III, Proyecto de Tesis (PR-FCE_2009_1_2616). Quím. Aline Katz (Tutor: Prof. Oscar N. Ventura).

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Doctorado)

Equipo: Oscar N. Ventura(Integrante); Patricia Saenz Méndez(Integrante); Aline Katz(Responsable)

Financiadores: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero

Palabras clave: PTP1B; Diabetes

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

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

2010 - 2012

Título: Lignina Kraft como fuente renovable de productos químicos de alto valor agregado, *Tipo de participación:* Otros/Orientador, *Descripción:* PROYECTO FINANCIADO Proyecto Modalidad III, Proyecto de Tesis (PR-FCE_2009_1_2616). Responsable: Lic. Virginia Aldabalde. Tutor: Patricia Saenz Méndez

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Maestría/Magister),

Equipo: Virginia Aldabalde(Responsable); Patricia Saenz Méndez(Integrante); Daniela Gamenara(Integrante)

Financiadores: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero

Palabras clave: Lignina; Productos químicos de alto valor agregado; Biocatálisis; Síntesis orgánica

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

2010 - 2013

Título: Catálisis en la síntesis de nucleósidos modificados. Preparación de Neplanocina A, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* PROYECTO FINANCIADO Proyecto I+D CSIC convocatoria 2010 Investigadoras Responsables: Dra. Daniela Gamenara - Dra. Margarita Brovetto

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Maestría/Magister),

Equipo: Gustavo Seoane(Integrante); Patricia Saenz Méndez(Integrante); Daniela Gamenara(Responsable); Margarita Brovetto(Integrante); Estefanía Dibello(Integrante)

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

Palabras clave: Neplanocina A; Nucleósidos; Organocatálisis

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

2008 - 2014

Título: Biosíntesis y degradación de lignina. Obtención de sustancias químicas útiles a partir de biomasa., *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* La materia constitutiva de los vegetales o biomasa, y en particular la lignina, constituye una materia prima reciclable que puede explotarse sin agotar los recursos del planeta. Sin embargo, actualmente no se está explotando todo su potencial. Esto enfatiza la necesidad de desarrollar nuevos procesos amigables, que permitan convertir la vasta fuente de lignina en productos útiles, como ser polímeros, precursores sintéticos y aditivos empleados en las industrias farmacéutica y alimentaria. Esta línea de investigación se concentra en la utilización de herramientas biotecnológicas, oxidaciones químicas y reacciones en fluidos supercríticos para 'refinar' la lignina, una materia prima de bajo valor, y transformarla en productos químicos de alto valor agregado. La aplicación de Química Computacional permite estudiar la estructura de la lignina, conocer sus particularidades conformacionales y sus características químicas. El acceso a tal tipo de información asiste en el diseño de las tecnologías que permiten la modificación controlada de la biomasa lignocelulósica en los productos deseados.

Tipo: Investigación

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

Equipo: Oscar N. Ventura(Integrante); Leif A. Eriksson(Integrante); Mariela Risso(Integrante); Virginia Aldabalde(Integrante)

Financiadores: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Apoyo financiero

Institución del exterior / Advanced Biomedical Computing Center-National Cancer Institute / Cooperación

Örebro Universitet / Cooperación

Palabras clave: Química de la madera; Lignina; Productos químicos de alto valor agregado; Biotecnología; Química Computacional

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

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

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

2013 - 2015

Título: Motivos recurrentes en productos bioactivos: síntesis, predicción del perfil de actividad biológica e identificación basada en el ligando de nuevos compuestos con actividad biológica definida, *Tipo de participación:* Coordinador o Responsable, *Descripción:* PROYECTO FINANCIADO Proyecto CSIC I+D Convocatoria 2012 Responsable Científico: Dra. Patricia Saenz Méndez

Tipo: Investigación

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

Equipo: Gustavo Seoane(Integrante); Oscar N. Ventura(Integrante); Mariela Risso(Integrante); Virginia Aldabalde(Integrante); Daniela Gamenara(Integrante); Eduardo Bermúdez(Integrante); Claudia Martínez(Integrante)

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

Palabras clave: Reacciones Multicomponente; Reacciones Dominó; Perfil de actividad biológica

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

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

2013 - 2015

Título: Oligo-tetrahidrofuranos 2,5-disustituídos. Síntesis quimioenzimática y evaluación biológica, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* PROYECTO FINANCIADO Proyecto CSIC I+D convocatoria 2012 Responsable Científico: Dr. Gustavo Seoane

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Doctorado)

Equipo: Gustavo Seoane(Responsable); Daniela Gamenara(Integrante); Margarita Brovetto(Integrante); Ignacio Carrera(Integrante); Juan Carlos Ramos(Integrante)

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

Palabras clave: Oligo-tetrahidrofuranos

2011 - 2015

Título: Recuperación de productos químicos de alto valor agregado a partir de lignina Kraft. Preparación de modelos de lignina y estructuras relacionadas con potencial sintético, *Tipo de participación:* Otros/Orientador, *Descripción:* Beca de Maestría ANII y de Doctorado ANII para Virginia Aldabalde.

Tipo: Investigación

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

Equipo: Gustavo Seoane(Integrante); Virginia Aldabalde(Responsable); Patricia Saenz Méndez(Integrante); Daniela Gaménara(Integrante)

Financiadores: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Beca

Palabras clave: Lignina; Productos químicos de alto valor agregado; Biocatálisis; Síntesis orgánica

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Biotransformaciones

2013 - 2015

Título: Síntesis enantioselectiva de derivados de ibogaina y evaluación preliminar de su perfil biológico como potenciales agentes anti-adictivos, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* PROYECTO FINANCIADO Proyecto FCE convocatoria 2012 (FCE_2_2011_1_6045) Responsable: I. Carrera

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Maestría/Magister),

Equipo: Gustavo Seoane(Integrante); Daniela Gaménara(Integrante); Margarita Broveto(Integrante); Ignacio Carrera(Responsable); Mariana Pazos(Integrante)

Financiadores: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero

Palabras clave: Ibogaína

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

2013 - 2015

Título: Síntesis y evaluación a campo de (7R)-(+)-beta-sesquifelandreno, feromona sexual de la chinche de la soja, Piezodorus Guildinii (Westwood), *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* PROYECTO FINANCIADO. Proyecto FMV, convocatoria 2012 (FMV_2_2011_1_6640) Responsable Científico: Dra. Daniela Gaménara

Tipo: Investigación

Alumnos: 1(Maestría/Magister),

Equipo: Gustavo Seoane(Integrante); Daniela Gaménara(Responsable); Margarita Broveto(Integrante); Estefanía Dibello(Integrante); Ignacio Carrera(Integrante); Andres González Ritzel(Integrante)

Financiadores: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Apoyo financiero

Palabras clave: Feromonas

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

2013 - 2016

Título: Estudio teórico de la resistencia a la insulina en la diabetes tipo II, *Tipo de participación:* Integrante del Equipo, *Descripción:* PROYECTO FINANCIADO Proyectos Fondo Conjunto de Cooperación México-Uruguay. Facultad de Química, UdelaR – Universidad Autónoma Metropolitana, UAM/Azcapotzalco. Responsable por UdelaR: Prof. Oscar N. Ventura. Responsable por UAM: Dr. Oscar Olvera Nería

Tipo: Desarrollo

Alumnos:

Equipo: Oscar N. Ventura(Integrante); Aline Katz(Integrante); Oscar Olvera Nería(Responsable)

Financiadores: Universidad Autónoma Metropolitana / Apoyo financiero

Palabras clave: Diabetes

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

Producción científica/tecnológica

Actualmente, la investigación se lleva a cabo en dos grandes frentes: el diseño computacional de compuestos bioactivos (antibióticos, antivirales, fármacos antidiabetes, aditivos alimentarios seguros para celíacos, etc.), y la predicción de poli-farmacología de compuestos bioactivos (nuevos o conocidos). La primera línea implica el desarrollo de nuevos compuestos bioactivos, empleando diferentes estrategias computacionales, fundamentalmente Tamizado Virtual de Alto Rendimiento (High-Thoroughput Virtual Screening, HTVS) empleando bases de datos de decenas de millones de potenciales fármacos, docking molecular, dinámica molecular, modelado por homología, empleo de farmacóforos, entre otras. Se están desarrollando potenciales antibióticos activos contra patógenos resistentes (*Pseudomonas aeruginosa*, *Staphylococcus aureus*, etc.), antivirales (coronavirus, Ebola, etc.), agentes antitumorales, aditivos alimentarios seguros para celíacos y fármacos antidiabetes. La segunda línea implica detectar para los potenciales fármacos derivados de la actividad anterior, el perfil de actividad biológica, empleando diferentes estudios

computacionales. En particular, mediante docking inverso (o reverso) se detectan posibles dianas biológicas, verificando así que no inhiban por ejemplo enzimas humanas, minimizando los potenciales efectos colaterales que puedan surgir de su empleo como fármacos. Por otro lado, el estudio de la poli-farmacología permite detectar otras posibles actividades biológicas deseables ('drug repurposing'), permitiendo utilizar fármacos conocidos para tratar patologías diferentes a las indicadas originalmente. Esto permite incrementar el valor de fármacos conocidos, aceptados en el mercado, detectando nuevas actividades biológicas. Desde 2009 se ha sido referenciado en decenas de artículos de journals internacionales, actuando como evaluadora asimismo en proyectos de investigación nacionales (CSIC) e internacionales (FONCYT), en convocatorias a becas de posgrado (ANII), movilidad (ANII) y como evaluadora externa de proyectos de Dedicación Total (Comisión Central de DT). Adicionalmente, la suscrita ha integrado tribunales de posgrado nacionales e internacionales. La suscrita ha aplicado activamente en diferentes convocatorias de proyectos de investigación, obteniendo financiación en varios de ellos, tanto a nivel nacional (PDT, CSIC) como internacional (Lindbergh Foundation, Unión Europea). Los fondos obtenidos han permitido desarrollar las tareas de investigación, financiar becarios, continuar la formación en el exterior, establecer cooperaciones internacionales y generar capacidades físicas. La producción científica ha sido presentada en numerosos congresos y publicada en revistas arbitradas. Adicionalmente, se ha publicado una revisión (Chem. Rev. 2011), tres capítulos de libros (Wiley 2012, Springer 2015 y RSC en proceso de edición), así como un libro completo (Wiley 2012). La postulante ha dirigido hasta su finalización una tesis de maestría (2014, acceso a Dedicación Total durante el posgrado), una tesis de doctorado (2015, Beca ANII Maestría y Doctorado, acceso a SNI durante el posgrado) y numerosos becarios de grado y estudiantes de licenciatura. Actualmente dirige como tutor principal dos tesis de doctorado, una de ellas a finalizar durante el segundo semestre de 2017 y la otra iniciada en 2015 (ambos estudiantes con beca de Doctorado ANII, uno de ellos integra el SNI). La consolidación en la formación de RRHH altamente calificados se considera un hito. Por todo lo expuesto se considera que se realiza un aporte significativo al fortalecimiento de la química y biología computacional en el Uruguay, así como a la investigación científica de calidad.

Producción bibliográfica

Artículos publicados

Arbitrados

Completo

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); KATZ, ALINE; PÉREZ-KEMPNER, M. L.; VENTURA, O. N.; VÁZQUEZ, M.

Structural insights into human microsomal epoxide hydrolase by combined homology modeling, molecular dynamics simulations and molecular docking calculations. Proteins: Structure, Function and Genetics (E), v.: 85, p.: 720 - 730, 2017

Palabras clave: Epoxide hydrolase; Epilepsy; Homology Models; Ensemble-based docking

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

Medio de divulgación: Internet ; ISSN: 10970134 ; DOI: 10.1002/prot.25251

<http://onlinelibrary.wiley.com/wol1/doi/10.1002/prot.25251/abstract>

La postulante es primer autor y autor de correspondencia. El nombre de la revista es actualmente PROTEINS: Structure, Function and Bioinformatics. Sin embargo al tener el mismo ISSN (1097-0134) que Proteins: Structure, Function and Genetics no permite grabar una nueva revista con el nombre correcto. De todas formas se adjunta la nota de aceptación.



Completo

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); ENGSTRÖM, N.; SCHEERS, J.; SCHEERS, N.

Towards Celiac-safe foods: Decreasing the affinity of transglutaminase 2 for gliadin by addition of ascorbyl palmitate and ZnCl₂ as detoxifiers. Scientific Reports, v.: 7 77, p.: 1 - 8, 2017

Palabras clave: Celiac disease; Homology modeling; Transglutaminase 2; Celia-safe foods

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

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 20452322 ; DOI: 10.1038/s41598-017-00174-z

<http://rdcu.be/pQf7>



Completo

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); ERIKSSON, M.; ERIKSSON, L. A.

Ligand Selectivity Between ADP-Ribosylating Toxins. An Inverse Docking Study for Multi-Target Drug Discovery (en prensa). ACS Omega, v.: 2 4, p.: 1710 - 1719, 2017

Palabras clave: Antibiotics; Pseudomonas aeruginosa; Diphtheria Toxin; Cholix Toxin; Exotoxin A; Inverse docking

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

Medio de divulgación: Internet ; ISSN: 24701343 ; DOI: 10.1021/acsomega.7b00010

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acsomega.7b00010>



Completo

FACCIO, R.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); KIENINGER, M.; VENTURA, O. N.

Using density functional theory to increase the accuracy of experimental crystal structures: the case of potassium peroxocarbonate. Journal of Molecular Structure, 2017

Palabras clave: Peroxocarbonate; DFT

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

Medio de divulgación: Internet ; ISSN: 00222860 ; DOI: 10.1016/j.molstruc.2017.05.115

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S002228601730724X>



Completo

AWADALLA, M. K. A.; ALSHAMMARI, T. M.; ERIKSSON, L. A.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Improved Homology Model of the Human all-trans Retinoic Acid Metabolizing Enzyme CYP26A1. Molecules, v.: 21 3, p.: 351 - 363, 2016

Palabras clave: CYP26A1; Homology model; Retinoic acid; Molecular docking

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

ISSN: 14203049 ; DOI: 10.3390/molecules21030351



Completo

BILLOD, J.-M.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); BLOMBERG, A.; ERIKSSON, L. A.

Structures, Properties, and Dynamics of Intermediates in eEF2-Diphthamide Biosynthesis. Journal of Chemical Information and Modeling, v.: 56, p.: 1776 - 1786, 2016

Palabras clave: Diphtheria Toxin; Elongation Factor 2; Antibiotics

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 15499596 ; DOI: 10.1021/acs.jcim.6b00223

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jcim.6b00223>



Completo

[BERMÚDEZ, E.; VENTURA, O. N.; ERIKSSON, L. A.; SAENZ MÉNDEZ, P. \(SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007\)](#)

[Improved Homology Model of Cyclohexanone Monooxygenase from Acinetobacter calcoaceticus based on multiple templates \(Autor de correspondencia\). Computational Biology and Chemistry, v.: 49, p.: 14 - 22, 2014](#)

Palabras clave: Homology Models; Cyclohexanone monooxygenase; Baeyer-Villiger reaction; Enzymatic oxidation

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado Biomolecular

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 14769271 ; DOI: 10.1142/S1793048012500087



Completo

RISSO, M.; MAZZINI, M.; KRÖGER, S.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); G. SEOANE; GAMENARA, D. Microwave assisted solvent-free lipase catalyzed transesterification of beta-ketoesters. Green Chemistry Letters and Reviews, 2012

Palabras clave: Lipase; Solvent-free

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

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 17518253 ; DOI: 10.1080/17518253.2012.672596



SCOPUS



Completo

FAGAN, VINCENT; BONHAM, SARAH; CARTY, M. P.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); ERIKSSON, L. A.; ALDABBAGH, F.

COMPARE analysis of the toxicity of an iminoquinone derivative of the imidazo[5,4-f]benzimidazoles with NAD(P)H:quinone Oxidoreductase 1 (NQO1) activity and computational docking of quinones as NQO1 substrates. Bioorganic & Medicinal Chemistry, v.: 20, p.: 3223 - 3232, 2012

Palabras clave: Anti-tumor; Bioreductive; DT-diaphorase; Heterocyclic compound

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Computacional
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Medicinal

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 09680896 ; DOI: 10.1016/j.bmc.2012.03.063



SCOPUS



Completo

ELMABSOUT, A. A.; KUMAWAT, A.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); KRIVOSPITSKAYA, O.; SÄVENSTRAND, H.; OLOFSSON, P. S.; ERIKSSON, L. A.; STRID, Å.; VALEN, G.; TÖRMA, H.; SIRSJÖ, A.

Cloning and Functional Studies of a Splice Variant of CYP26B1 Expressed in Vascular Cells. PLoS ONE, v.: 7 5, p.: 1 - 8, 2012

Palabras clave: CYP26; Cloning

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biomedicina

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 19326203 ; DOI: 10.1371/journal.pone.0036839

<http://www.plosone.org/article/info%3Adoi%2F10.1371%2Fjournal.pone.0036839>



SCOPUS



Completo

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); ELMABSOUT, A. A.; SÄVENSTRAND, H.; AWADALLA, M. K. A.; STRID, Å.; SIRSJÖ, A.; ERIKSSON, L. A.

Homology Models of Human all-trans-Retinoic Acid Metabolizing Enzymes CYP26B1 and CYP26B1 Spliced-Variant. Journal of Chemical Information and Modeling, 2012

Palabras clave: CYP26; Retinoids; Homology Models

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Modelado Biomolecular

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 15499596 ; DOI: 10.1021/ci300264u



SCOPUS



Completo

KATZ, ALINE; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); COUSIDO-SIAH, A.; PODJARNY, A. D.; VENTURA, O. N.

Experimental and Theoretical Study of the Movement of the WPD Flexible Loop of Human Protein Tyrosine Phosphatase PTP1B in Complex with Halide Ions. Biophysical Reviews and Letters, v.: 7, p.: 1 - 21, 2012

Palabras clave: Protein Tyrosine Phosphatase

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

Medio de divulgación: Otros ; ISSN: 17930480

Completo

BROVETTO, M.; GAMENARA, D.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); G. SEOANE
C-C bond forming lyases in organic synthesis. Chemical reviews, v.: 111, p.: 4346 - 4403, 2011

Palabras clave: Lyases

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092665 ; DOI: 10.1021/cr100299p



SCOPUS



Completo

VENTURA, O. N.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); BOTINNELLI, F.

Computational study on the dechlorination of chloropicrin fumigant for sulfur species. Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 130 4, p.: 955 - 963, 2011

Palabras clave: Hydrogen sulfide species; Chloropicrin

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 1432881X ; DOI: 10.1007/s00214-011-1057-y



SCOPUS



Completo

DOS SANTOS, D. J. V. A.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); ERIKSSON, L. A.; GUEDES, R. C.

Properties and behaviour of tetracyclic allopsoralen derivatives inside a DPPC lipid bilayer model. Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 13, p.: 10174 - 10182, 2011

Palabras clave: Allopsoralens

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 14639076 ; DOI: 10.1039/C0CP02245D



SCOPUS



Completo

ALDABALDE, V.; RISSO, M.; DERRUDI, M. L.; GEYMONAT, F.; G. SEOANE; GAMENARA, D.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Organocatalyzed Decarboxylation of Naturally Occurring Cinnamic acids: Potential Role in Flavoring Chemicals Production (Autor de correspondencia). Open Journal of Physical Chemistry (On-line), v.: 1 3, p.: 85 - 93, 2011

Palabras clave: unsaturated carboxylic acids; Decarboxylation; Styrenes; Organocatalysis; Knoevenagel

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

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

Medio de divulgación: Internet ; ISSN: 21621977 ; DOI: 10.4236/ojpc.2011.13012

<http://www.scirp.org/journal/PaperInformation.aspx?paperID=8755>



SCOPUS



Completo

BERMÚDEZ, E.; VENTURA, O. N.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Mechanism of Organocatalyzed Decarboxylative Knoevenagel-Doenber Reaction. A Theoretical Study (Autor de correspondencia). Journal of Physical Chemistry A, v.: 114, p.: 13086 - 13092, 2010

Palabras clave: Density Functional Theory; Organocatalysis; Vinylphenols; Knoevenagel condensation

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

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 10895639

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



SCOPUS

Completo

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); CACHAU, R. E.; G. SEOANE; VENTURA, O. N.

Regioselective epoxide ring-opening using boron trifluoride diethyl etherate. DFT study of an alternative mechanism to explain the formation of syn-fluorohydrins (autor de correspondencia). Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 904, p.: 21 - 27, 2009

Palabras clave: Físicoquímica orgánica; Fluorohidrinás; Apertura de epóxidos

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 01661280 ; DOI: 10.1016/j.theochem.2009.02.02

Primer autor y autor de correspondencia.



SCOPUS



Completo

KIENINGER, M.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); VENTURA, O. N.

On the experimental structure of monoperoxocarbonic acid and the enthalpy of formation of carbonic acid, peroxyformic acid and monoperoxocarbonic acid in gas phase (autor de correspondencia). Chemical Physics Letters, v.: 480, p.: 52 - 56, 2009

Palabras clave: Ácido peroxocarbónico; Química Computacional

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

Medio de divulgación: Internet ; ISSN: 00092614 ; DOI: 10.1016/j.cplett.2009.08.062

Autor de correspondencia



SCOPUS



Completo

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); ERIKSSON, L. A.; VENTURA, O. N.

Theoretical study of the structure of neutral, radical and anionic monoperoxo carbonic acid. Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 913, p.: 131 - 138, 2009

Palabras clave: CO₂ supercrítico; Epoxidaciones; Ácido peroxocarbónico; DFT

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 01661280 ; DOI: 10.1016/j.theochem.2009.07.029



SCOPUS



Completo

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); GUEDES, R. C.; DOS SANTOS, D. J. V. A.; ERIKSSON, L. A.

Theoretical prediction of binding modes and hot sequences for allopsoralen-DNA interaction. Chemical Physics Letters, v.: 450, p.: 127 - 131, 2007

Palabras clave: allopsoralen; Intercalation; DNA docking; Photodynamic therapy

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de fármacos

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

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00092614 ; DOI: 10.1016/j.cplett.2007.10.105 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



SCOPUS



Completo

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); GUEDES, R. C.; DOS SANTOS, D. J. V. A.; ERIKSSON, L. A.

Theoretical study of sequence selectivity and preferred binding mode of psoralen with DNA. Research Letters in Physical Chemistry, v.: 01, p.: 1 - 5, 2007

Palabras clave: Psoralen; Intercalation; DNA; Photochemotherapy; Docking studies

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de fármacos

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

Química Computacional

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 16876873 ; DOI: 10.1155/2007/60623 ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos

Completo

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); CACHAU, R. E.; G. SEOANE; KIENINGER, M.; VENTURA, O. N. A New Perspective in the Lewis Acid Catalyzed Ring Opening of Epoxides. Theoretical Study of Some Complexes of Methanol, Acetic Acid, Dimethylether, Diethylether, and Ethylene Oxide with Boron Trifluoride. *Journal of Physical Chemistry A*, v.: 110, p.: 11734 - 11751, 2006

Palabras clave: DFT; epoxide; Reaction mechanisms; Hydrogen bonded complexes

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

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 10895639 ; DOI: 10.1021/jp061359y ; Idioma/Pais: Inglés/Estados Unidos



SCOPUS



Completo

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M.; RISSO, M.; OLEA-AZAR, C.; BRUNO, A. M.; EZPELETA, O; LÓPEZ DE CERÁIN, A.; MONGE, A.

1,2,4-Triazine N-oxide Derivatives: Studies as Potential Hypoxic Cytotoxins. Part III. *Archiv der Pharmazie*, v.: 337 5, p.: 271 - 280, 2004

Palabras clave: 1,2,4-Triazine N-oxide; Bioreductive compounds; Redox properties.

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

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 03656233 ; DOI: 10.1002/ardp.200300839 ; Idioma/Pais: Inglés/Alemania



SCOPUS



Completo

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M.; ONETTO, S.; EZPELETA, O; LÓPEZ DE CERÁIN, A.; MONGE, A.

1,2,4-Triazine N-oxide Derivatives: Studies as Potential Hypoxic Cytotoxins. Part II. *Archiv der Pharmazie*, v.: 337 5, p.: 247 - 258, 2004

Palabras clave: 1,2,4-Triazine N-oxide; Bioreductive compounds; Iminium electrophile

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

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

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 03656233 ; DOI: 10.1002/ardp.200300782 ; Idioma/Pais: Inglés/Alemania



SCOPUS



Completo

BOIANI, M; BUCCINO, P; CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M; LÓPEZ, V; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); SEOANE, G; LOUREIRO, S; MÍGUEZ, M; OTEGUI, X

Molecular Modeling as Didactic Tool for the First Course of Organic Chemistry. *Educación Química*, v.: 15, p.: 349 - 352, 2004

Palabras clave: Modelado Molecular; Química Orgánica

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Modelado Molecular

Medio de divulgación: Otros ; ISSN: 0187893X



Completo

CASTRO A.; HERNANDEZ, L.; DORRONSORO, I.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); PÉREZ, C.; KALKO, S.; OROZCO, M.; LUQUE, F.; MARTÍNEZ GIL, A.
Synthesis, Biological Evaluation and Modeling Studies of Dual Binding AChE Inhibitors. *Medicinal Chemistry Research*, v.: 11 4, p.: 219 - 237, 2002

Palabras clave: AChE Inhibitors; Molecular Modelling

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Medicinal
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Computacional
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 10542523 ; Idioma/Pais: Inglés/Alemania



SCOPUS

Completo

CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); ONETTO, S.; RISSO, M.; G. SEOANE; BRUNO, A. M.; ALARCÓN, J.; OLEA-AZAR, C.; LÓPEZ DE CERÁIN, A.; EZPELETA, O; MONGE, A.
1,2,4-triazine N-oxide and N,N'-dioxide derivatives: studies as potential hypoxic cytotoxins and DNA binder. *Medicinal Chemistry Research*, v.: 10 5, p.: 328 - 337, 2001

Palabras clave: Hypoxic cytotoxins

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 10542523



SCOPUS

Completo

SEOANE, G; CERECETTO, H.; PANDOLFI, E; GONZÁLEZ, M; DI MAIO, R; BROVETTO, M; LÓPEZ, V; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); BUCCINO, P; DIAS, E
Percepción Estudiantil de Cursos de Laboratorio de Química Orgánica. Tradicionales y con Mini-Proyectos de Investigación. *Aldeq - Anuario Latinoamericano de Educación Química*, p.: 83 - 122, 2001

Palabras clave: Química Orgánica

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 0328087X



Completo

SEOANE, G; CERECETTO, H.; PANDOLFI, E; GONZÁLEZ, M; DI MAIO, R; BROVETTO, M; LÓPEZ, V; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); BUCCINO, P; DIAS, E
Aplicación de Talleres de Investigación en el Curso Práctico de Química Orgánica. *Aldeq - Anuario Latinoamericano de Educación Química*, p.: 123 - 128, 2001

Palabras clave: Química Orgánica

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 0328087X



Completo

CERECETTO, H.; DIAS, E.; GONZÁLEZ, M.; PACCE, S.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); G. SEOANE; FERNÁNDEZ, G.; LEMA, M.; VILLALBA, J.; MOMBRÚ, A.; MARIEZCURRENA, R.
Synthesis and herbicidal activity of N-oxide derivatives. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, v.: 48, p.: 2995 - 3902, 2000

Palabras clave: Herbicidal activity

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00218561 ; DOI: 10.1021/jf9904766



SCOPUS



Completo

CERECETTO, H.; DI MAIO, R.; GONZÁLEZ, M.; RISSO, M.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); G. SEOANE; DENICOLA, A.; PELUFFO, G.; QUIJANO, C.; ZINOLA, F.; OLEA-AZAR, C.

1,2,5-oxadiazole N-oxide derivatives and related compounds as potential antitrypanosomal drugs. Structure-activity relationship. Journal of Medicinal Chemistry, v.: 42, p.: 1941 - 1950, 1999

Palabras clave: antitrypanosomal drugs

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

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

Medio de divulgación: Papel ; ISSN: 00222623 ; DOI: 10.1021/jm9805790



SCOPUS



Artículos aceptados

Arbitrados

Completo

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); NANDY, A.; GORMAN, A. M.; SAMALI, A.; ERIKSSON, L. A.

Homology Model of the Human tRNA Splicing Ligase RtcB. Proteins: Structure, Function and Genetics, 2017

Palabras clave: tRNA ligase ; Cáncer; Homology model; Umbrella sampling

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

Medio de divulgación: Internet ; ISSN: 08873585 ; DOI: 10.1002/prot.25352

<http://onlinelibrary.wiley.com/wol1/doi/10.1002/prot.25352/full>



SCOPUS



Libros

Libro publicado , Texto integral

GAMENARA, D.; G. SEOANE; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); DOMÍNGUEZ DE MARÍA, P.

Redox Biocatalysis: Fundamentals and Applications. 2012. Nro. de páginas: 548,

Editorial: John Wiley & Sons, Inc. , Hoboken, NJ

Palabras clave: Biocatalysis; Redox enzymes

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

Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 9780470874202;

<http://www.wiley.com/WileyCDA/WileyTitle/productCd-0470874201.html>

Capítulos de Libro

Capítulo de libro publicado

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); GENHEDEN, S.; REYMER, A.; ERIKSSON, L. A.

Computational chemistry and molecular modelling basics (en proceso de Edición) , 2017

Libro: Computational Tools for Chemical Biology. v.: 1, p.: 1 - 24,

Organizadores: Martin Santamaria, Sonsoles (editora)

Editorial: Royal Society of Chemistry

Palabras clave: Computational Chemistry

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

Medio de divulgación: Papel; En prensa: Si

Financiación/Cooperación: Gothenburg University / Cooperación

En proceso de edición

Capítulo de libro publicado

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); ERIKSSON, L. A.

Exploring polypharmacology in drug design , 2017

Libro: Rational Drug Design: Methods and Protocols. v.: 1, p.: 1 - 15,

Organizadores: Thomas Mavromoustakos and Tashin F. Kellici

Editorial: Springer

Palabras clave: Drug design; Polypharmacology

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

Medio de divulgación: Papel;

Financiación/Cooperación: Facultad de Química - UDeLaR / Otra

En proceso de edición. Autor de correspondencia

Capítulo de libro publicado

BOTINNELLI, F.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); VENTURA, O. N.

Computational study of the initial step in the reaction mechanism of Dehaloperoxidase A. Consistent assignment of the protonation of residues at the active site and the movement of the His55 residue , 2015

Libro: Quantum Modeling of Complex Molecular Systems, Challenges and Advances in Computational Chemistry and Physics. v.: 1 , 1, p.: 367 - 382,

Editorial: Springer

Palabras clave: Dehaloperoxidasa

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

Medio de divulgación: Internet;

Financiación/Cooperación: Facultad de Química - UDeLaR / Otra

Libro editado (Jean-Louis Rivail y Xavier Manuel Assfeld editores) con capítulos de trabajos científicos originales (estilo artículos científicos). Actualmente en etapa de publicación, ya aceptado.

Capítulo de libro publicado

GAMENARA, D.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); G. SEOANE; DOMÍNGUEZ DE MARÍA, P.

Ionic Liquids as (co)-solvents for non-hydrolytic enzymes , 2012

Libro: Ionic Liquids in Biotransformations & Organocatalysis: Solvents and Beyond. v.: 1 , 1, p.: 229 - 260,

Organizadores: Pablo Domínguez de María (Editor)

Editorial: John Wiley & Sons Inc. , Hoboken (NJ, USA)

Palabras clave: Ionic Liquids; Biotransformations; Biocatalysis

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Biotatálisis

Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 9780470569047;

<http://www.wiley.com/WileyCDA/WileyTitle/productCd-0470569042.html>

Trabajos en eventos

Resumen expandido

CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); G. SEOANE

Reactivity studies of 5,6-dimethyl- and 3,5,6-trimethyl-1,2,4-triazine-N4-oxide against different electrophiles , 2000

Evento: Regional , 12th National Symposium of Organic Chemistry (XII SINAQO) , 2000

Anales/Proceedings: Molecules , 5 , 501 , 502

Editorial: Molecular Diversity Preservation International (MDPI) , Basel, Switzerland

Palabras clave: regioselectivity; electrophiles

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

Medio de divulgación: Papel; ISSN/ISBN: 1420-3049;

Resumen

CASTRO A.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); PÉREZ, C.; LYNE, P. D.; RICHARDS, W. G.; MARTÍNEZ, A.

De novo design of cholinomimetic drugs: a new family of acetylcholinesterase inhibi , 1999

Evento: Internacional , XV Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica , Valencia , 1999

Anales/Proceedings: Methods and Findings in Experimental and Clinical Pharmacology , 21 , 46 , 46

Editorial: Prous Science , Barcelona, España

Palabras clave: cholinomimetic drugs

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

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

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

Medio de divulgación: Papel; *ISSN/ISBN:* 0379-0355;

Resumen

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M.; G. SEOANE; EZPELETA, O; LÓPEZ DE CERÁIN, A.; MONGE, A.

Synthesis of 1,2,4-triazine N-oxides derivatives. Evaluation as hypoxia-selective cytotoxins. Part III , 1999

Evento: Internacional , XV Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica , Valencia , 1999

Anales/Proceedings: Methods and Findings in Experimental and Clinical Pharmacology , 21 , 187 , 187

Editorial: Prous Science , Barcelona, España

Palabras clave: triazine N-oxide derivatives

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

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

ISSN/ISBN: 0379-0355;

Producción técnica

Trabajos Técnicos

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); GAMENARA, D.; G. SEOANE; BROVETTO, M.; CARRERA, I.

Síntesis y evaluación a campo de (7R)-(+)-beta-sesquifelandreno, feromona sexual de la chinche de la soja, Piezodorus Guildinii (Westwood) , 2012 , 40 , 24

Institución financiadora: ANII

Palabras clave: Feromonas

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

PROYECTO FINANCIADO Proyecto FMV-ANII Convocatoria 2012 Responsable Científico: Dra. Daniela Gamenara

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); GAMENARA, D.; G. SEOANE; VENTURA, O. N.; RISSO, M.; DENICOLA, A.

Modificación catalítica de lignina para la obtención de productos de alto valor agregado , 2012 , 50 , 24

Institución financiadora: ANII

Palabras clave: Lignina

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

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

PROYECTO NO FINANCIADO. APROBADO ACADÉMICAMENTE Proyecto FMV-ANII. Convocatoria 2012 Responsable Científico: Dra. Patricia Saenz

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); PAZOS, M.; CARRERA, I.; GAMENARA, D.; BROVETTO, M.; G. SEOANE

Síntesis enantioselectiva de derivados de ibogaina y evaluación preliminar de su perfil biológico como potenciales agentes anti-adictivos , 2012 , 40 , 24

Institución financiadora: ANII

Palabras clave: Ibogaina

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

PROYECTO FINANCIADO Proyecto FCE-ANII Convocatoria 2012 Responsable Científico: Dr. Ignacio Carrera

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); G. SEOANE; GAMENARA, D.; BROVETTO, M.; RAMOS, J. C.; CARRERA, I.

Oligo-tetrahidrofuranos 2,5-disustituídos. Síntesis quimioenzimática y evaluación biológica , 2012 , 40 , 24

Institución financiadora: CSIC-UdelaR

Palabras clave: Oligo-tetrahidrofuranos

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

PROYECTO FINANCIADO Proyecto CSIC I+D Convocatoria 2012 Responsable Científico: Dr. Gustavo Seoane

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); DERRUDI, M. L.

Modificación quimioenzimática de residuos forestoindustriales. Obtención de polifenoles con potencial actividad curtiente , Obtención de productos de alto valor agregado a partir de lignina Kraft (UPM) y transformación en productos con potencial actividad curtiente , 2010 , 12

Institución financiadora: ANII

Palabras clave: Lignina; Polifenoles; Actividad curtiente

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

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

Beca de iniciación para María Lucía Derrudi. Financiada por ANII (BE_INI_2010_2107)

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); BERMÚDEZ, E.

Diseño computacional de reacciones multicomponente y dominó para la síntesis de productos naturales y farmacéuticos , Diseño de reacciones multicomponente y dominó con potencial uso en síntesis de productos naturales y farmacéuticos , 2010 , 12

Institución financiadora: ANII

Palabras clave: Reacciones Dominó; Reacciones Multicomponente; Organocatálisis; Química Computacional

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

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

Beca de iniciación para Eduardo Bermúdez. Financiada por ANII (BE_INI_2010_2054)

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Síntesis organocatalítica de motivos recurrentes en productos naturales. Generación de diversidad molecular a través de reacciones multicomponente y dominó , Síntesis de estructuras moleculares recurrentes en productos naturales y farmacéuticos , 2010 , 24

Institución financiadora: ANII

Palabras clave: Reacciones Dominó; Reacciones Multicomponente; Organocatálisis

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

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

No financiado, aprobado académicamente. Convocatoria FCE 2010 Responsable científico: Dra. Patricia Saenz Méndez Equipo de investigación: Virginia Aldabalde, Federico Geymonat, Mariela Risso, Daniela Gaménara, Gustavo Seoane y David MacMillan (Princeton University)

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); ALDABALDE, V.

Lignina Kraft como fuente renovable de productos químicos de alto valor agregado , Obtención de productos químicos de alto valor agregado a partir de remanentes forestoindustriales , 2010 , 18

Institución financiadora: ANII

Palabras clave: Lignina; Productos químicos de alto valor agregado

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

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

PROYECTO FINANCIADO. Convocatoria FCE 2010. Proyecto FCE, Modalidad III, tesista de posgrado. Investigador responsable: Virginia Aldabalde. Tutor: Dra. Patricia Saenz Méndez Co-Tutor: Dra. Daniela Gamenara

Elaboración de proyecto

KATZ, ALINE; VENTURA, O. N.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Estudio del movimiento del lazo flexible WPD de la proteína tirosina fosfatasa humana PTP1B y los factores que lo influyen , Estudio computacional de la proteína tirosina fosfatasa humana , 2010 , 18

Institución financiadora: ANII

Palabras clave: Tirosina Fosfatasa; Lazo WPD

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

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

Bioinformática

Medio de divulgación: Otros; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

PROYECTO FINANCIADO. Convocatoria FCE 2010. Proyecto FCE, Modalidad III, tesista de posgrado. Investigador responsable: Aline Katz. Tutor: Dr. Oscar N. Ventura Consultor: Dra. Patricia Saenz Méndez

Elaboración de proyecto

PILLI, R.; MONTES D'OCA, M. G.; G. SEOANE; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); BROVETTO, M.; SCHAPIRO, V.; PANDOLFI, E.; GONZÁLEZ, D.; GAMENARA, D.; SANTOS, L. S.; SERRA, G.; MISCHNE, M.; RUSSOWSKY, D.; ALMEIDA SILVA, P. E.; CRECZYNSKI-PASA, T. B.; MANTA, E.; MAHLER, G.; SCARONE, L.; DAVYT, D.; MATA, E. Red Virtual para la Prospección de Moléculas Activas en el Tratamiento de Dolencias Incidentes en América del Sur , Red de cooperación regional. Proyecto de investigación en cooperación entre distintos grupos regionales en el tema de Moléculas Activas , 2010

Institución financiadora: PROSUL, Programas Multilaterales CNPq

Palabras clave: Moléculas Bioactivas

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* Montevideo/Brasil

No financiado, aprobado académicamente. Coordinador por el Laboratorio de Síntesis Orgánica: Dr. Gustavo Seoane Participación de la Dra. Patricia Saenz Méndez en la elaboración del proyecto e integrante del equipo de investigación. Grupos participantes de Brasil, Chile, Uruguay y Argentina.

Elaboración de proyecto

GAMENARA, D.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); BROVETTO, M.; G. SEOANE

Desarrollo de metodologías ambientalmente sostenibles para la síntesis de feromonas de insectos plaga , Síntesis de feromonas para el control de plagas , 2010 , 24

Institución financiadora: ANII

Palabras clave: Feromonas; Biocatálisis

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

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

PROYECTO NO FINANCIADO. APROBADO ACADÉMICAMENTE. Convocatoria FCE 2010. Responsable científico: Dra. Daniela Gamenara Participación como integrante del equipo de investigación.

Elaboración de proyecto

BROVETTO, M.; G. SEOANE; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); GAMENARA, D.

Síntesis quimioenzimática y estereocontrolada del fragmento C5-C21 de Amfinolidas de la serie-T , Síntesis asimétrica de productos de origen marino , 2010 , 24

Institución financiadora: ANII

Palabras clave: Síntesis quimioenzimática; Síntesis estereoselectiva

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

Medio de divulgación: Otros; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

No financiado, aprobado académicamente. Convocatoria FCE 2010. Responsable científico: Dra. Margarita Brovotto Participación como integrante del equipo de investigación.

Elaboración de proyecto

GAMENARA, D.; BROVETTO, M.; G. SEOANE; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Catálisis en síntesis de nucleósidos modificados. Preparación de Neplanocina A. , Síntesis bio y organocatalítica de nucleósidos modificados , 2010 , 24

Institución financiadora: CSIC-UdelaR

Palabras clave: Nucleósidos; Biocatálisis

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

PROYECTO FINANCIADO. Convocatoria CSIC I+D 2010. Responsable científico: Dra. Daniela Gaménara y Dra. Margarita Brovotto Participación como integrante del equipo de investigación.

Elaboración de proyecto

G. SEOANE; GAMENARA, D.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); BROVETTO, M.

Estudio de la síntesis, caracterización y aplicaciones de polímeros (oligómeros) quirales producidos por dihidroxilación enzimática de aromáticos simples , Síntesis de polímeros de ciclohexadieno dioles quirales , 2010 , 24

Institución financiadora: CSIC-UdelaR

Palabras clave: Ciclohexadieno dioles; Polímeros quirales

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

No financiado, aprobado académicamente. Convocatoria CSIC I+D 2010. Responsable científico: Dr. Gustavo Seoane Participación como integrante del equipo de investigación.

Elaboración de proyecto

MARTÍN, V. S.; G. SEOANE; BROVETTO, M.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); GAMENARA, D.; PADRÓN, J. M.; RAMÍREZ, M. A.; GARCÍA, C.; LEÓN, L. G.; PÉREZ-ROTH, E.; RIOS-LUCI, C.; TONN, C.; KURINA, M.; CIFUENTE, D.; ORDEN, A.; BRITO, I.; ALBANEZ, J.; VALLEJOS, J.; CÁRDENAS, A.; KESTERNICH, V.; PÉREZ, M.; PAULINO, M.; CANO, T.; JUAREZ, R.; QUISPE, L.; GORRITI, C.; FERNÁNDEZ, L.; COAYLA, C.

Productos naturales y sintéticos de alta polaridad. Aplicaciones terapéuticas , Síntesis de productos naturales y no-naturales polares con potencial aplicación terapéutica , 2010 , 48

Institución financiadora: CYTED - España

Palabras clave: Productos Bioactivos

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* /España

Presentado a la Convocatoria Red Temática - CYTED Coordinador general: Dr. Javier Fernández (Universidad de la Laguna, España) Coordinador del grupo en Facultad de Química: Dr. Gustavo Seoane Participación como integrante del equipo de investigación.

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); DERRUDI, M. L.

Síntesis organocatalítica de motivos recurrentes en productos naturales. Generación de diversidad a través de reacciones multicomponente y dominó , Síntesis de moléculas de alta oportunidad mediante reacciones multicomponente organocatalizadas , 2009 , 18

Institución financiadora: CSIC-UdelaR

Palabras clave: Reacciones multicomponente y dominó; Organocatálisis; Click Chemistry

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

Medio de divulgación: Otros; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

Proyecto de iniciación a la investigación. No financiado, aprobado académicamente. Investigador responsable: María Lucía Derrudi. Tutor: Dra. Patricia Saenz Méndez

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); ALDABALDE, V.

Lignina Kraft como fuente renovable de productos químicos de alto valor agregado , Obtener productos de alto valor agregado a partir de remanentes foresto-industriales (Lignina Kraft) , 2009 , 12

Institución financiadora: CSIC-UdelaR

Palabras clave: Lignina; Productos químicos de alto valor agregado

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

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

Medio de divulgación: Otros; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

Proyecto de iniciación a la investigación. No financiado, aprobado académicamente. Investigador responsable: Lic. Virginia Aldabalde. Tutor: Dra. Patricia Saenz Méndez

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Biosíntesis y degradación de lignina. Obtención de sustancias químicas útiles a partir de biomasa , Proyecto de aspiración al Régimen de Dedicación Total , 2008

Institución financiadora: Universidad de la República

Palabras clave: Lignina; Productos químicos de alto valor agregado; Química Computacional; Síntesis orgánica; Biotecnología

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

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

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

Ciudad: Montevideo/Uruguay

Proyecto aprobado. Ingreso al Régimen de Dedicación Total: Setiembre de 2008

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Employing Biotechnical Tools to Convert Lignin Waste into High Value Organic Chemicals for Leather Tanning in Uruguay , Obtención de productos de alto valor agregado a partir de lignina Kraft (UPM) y transformación en productos curtientes de cuero , 2008 , 12

Institución financiadora: Lindbergh Foundation

Palabras clave: Lignina; Polifenoles; Curtido de cuero; Productos de alto valor agregado

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

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química de la Madera

Medio de divulgación: Internet; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* Anoka, Estados Unidos de América/Estados Unidos

<http://www.lindberghfoundation.org/docs/index.php/patricia-saenz-mendez>

Proyecto financiado. 2009-2010 Uno de los ocho (8) proyectos seleccionados de más de 130 presentados a nivel mundial. Responsable científico: Dra. Patricia Saenz Méndez.

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Producción biotecnológica de químicos a partir de lignina Kraft , Obtener productos de alto valor agregado a partir de remanentes foresto-industriales (Lignina Kraft) , 2008 , 24

Institución financiadora: CSIC-UdelaR

Palabras clave: Lignina; Productos químicos de alto valor agregado

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

Medio de divulgación: Otros; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

Proyecto aprobado académicamente, no financiado. Responsable científico: Dra. Patricia Saenz Méndez Equipo de investigación: Virginia Aldabalde, Daniela Gamnara y Margarita Brovetto

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Implementación de una plataforma biotecnológica para la valorización de la cadena forestal , Proyecto multidisciplinario regional de aplicación de herramientas biotecnológicas en el área forestoindustrial , 2008 , 24

Institución financiadora: Unión Europea, Mercosur-Biotech

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

Proyecto aprobado académicamente. No financiado. Presentado el programa 'Apoyo de las Biotecnologías en el Mercosur'. Investigadores de diferentes países e instituciones. Coordinadora por Facultad de Química: Dra. Patricia Saenz Méndez

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); G. SEOANE

Oligomerization of chiral cyclohexadienediols. Synthesis and potential uses , 2002

Institución financiadora: Academia de Ciencias del Tercer Mundo-TWAS

Palabras clave: Ciclitolos; Oligómeros

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

Ciudad: Montevideo/Uruguay

Proyecto aceptado académicamente. No financiado

Elaboración de proyecto

PORCIÚNCULA-GONZÁLEZ, D. C.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); GIACOMINI, C.; IRAZOQUI, G. Diseño racional y síntesis enzimática de galactósidos con potencial actividad como inhibidores de galectinas , 2016 , 15 , 12

Institución financiadora: CSIC (Comisión Sectorial de Investigación Científica)

Palabras clave: Galectinas

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

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

Proyecto de Iniciación Financiado (CSIC iniciación convocatoria 2016) Responsable: Cecilia Porciúncula Tutoras: Dra. Patricia Saenz-Méndez, Dra. Cecilia Giacomini, Dra. Gabriela Irazoqui

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); IRAZOQUI, G.; SOULE, S.; PORCIÚNCULA, C.; GIACOMINI, C.

Desarrollo de inhibidores de galectinas combinando estrategias computacionales y enzimáticas: evaluación como potenciales agentes antitumorales , 2016 , 15 , 24

Institución financiadora: CSIC

Palabras clave: Galectinas

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biocatálisis

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

Proyecto en evaluación. CSIC I+D convocatoria 2016. Responsables científicos del proyecto: Dra. Gabriela Irazoqui y Dra. Patricia Saenz-Méndez

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Inhibiting Pseudomonas aeruginosa, a multidrug resistant pathogen , Movilidad de excelencia, para atraer investigadores prometedores a Suecia , 2015 , 15 , 12

Institución financiadora: *Unión Europea, FP7/Marie Curie, MoRE (Mobility for Regional Excellence)*

Palabras clave: *Antibiotics; Resistant pathogens*

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

Medio de divulgación: *Otros; Disponibilidad: Restricada; Ciudad: Gothenburg/Suecia*

<http://www.vgregion.se/sv/Vastra-Gotalandsregionen/startside/Regionutveckling/FoU/Program-FoU/More/MoRE-fellows/>

Contacto responsable por la Universidad de Gotemburgo: Prof. Leif A. Eriksson

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); BERMÚDEZ, E.; VENTURA, O. N.

Nuevos blancos para nuevos antibióticos: Predicción de poli-farmacología de inhibidores de Sortasa A , 2014 , 15 , 24

Institución financiadora: CSIC-UdelaR

Palabras clave: Poli-farmacología; Antibióticos; Docking-inverso

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

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestricada; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

PROYECTO NO FINANCIADO. APROBADO ACADÉMICAMENTE Presentado a la convocatoria I+D 2014. Responsable científico: Dra. Patricia Saenz Méndez

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); KATZ, ALINE; VENTURA, O. N.; PÉREZ, M. L.

Modelo conformacional de la enzima epóxido hidrolasa microsomal y sus interacciones con diferentes fármacos anticonvulsivantes , 2014 , 15 , 24

Institución financiadora: CSIC-UdelaR

Palabras clave: Epilepsia

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

Medio de divulgación: Otros; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

PROYECTO NO FINANCIADO. APROBADO ACADÉMICAMENTE Presentado a la convocatoria I+D 2014. Responsable científico: Dra. Aline Katz

Elaboración de proyecto

OLVERA NERIA, O.; VENTURA, O. N.; SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); KATZ, ALINE

Estudio teórico de la resistencia a la insulina en la diabetes tipo II , 2013 , 40 , 24

Institución financiadora: AMEXID (México) y AUCI (Uruguay)

Palabras clave: Diabetes; Resistencia a insulina

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestringida; *Ciudad:* México D.F. y Montevideo/México

PROYECTO DE COOPERACIÓN FINANCIADO Fondo Conjunto de Cooperación México-Uruguay. UdelaR-Universidad Autónoma Metropolitana. Responsable Científico: Dres. Ventura y Olvera Neria

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); BERMÚDEZ, E.; GAMENARA, D.; VENTURA, O. N.; RISSO, M.; CARRERA, I.; BROVETTO, M.

Motivos recurrentes en productos bioactivos: síntesis, predicción del perfil de actividad biológica e identificación basada-en-el-ligando de nuevos compuestos con actividad biológica definida , 2012 , 50 , 24

Institución financiadora: ANII

Palabras clave: Reacciones Dominó; Reacciones Multicomponente

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

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestringida; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

PROYECTO NO FINANCIADO. APROBADO ACADÉMICAMENTE Proyecto FCE-ANII. Convocatoria 2012 Responsable Científico: Dra. Patricia Saenz

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); BERMÚDEZ, E.; VENTURA, O. N.; G. SEOANE; ALDABALDE, V.; RISSO, M.

Motivos recurrentes en productos bioactivos: síntesis, predicción del perfil de actividad biológica e identificación basada en el ligando de nuevos compuestos con actividad biológica definida , 2012 , 15 , 24

Institución financiadora: Uruguay

Palabras clave: Reacciones Multicomponente; Reacciones Dominó

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

Medio de divulgación: Otros; *Disponibilidad:* Irrestringida; *Ciudad:* Montevideo/Uruguay

PROYECTO FINANCIADO Proyecto CSIC I+D convocatoria 2012 Responsable Científico: Dra. Patricia Saenz Méndez

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Modelado molecular de la estructura de la lignina , Estudio de la biosíntesis de la lignina y de sus reacciones , 2006 , 18

Institución financiadora: PDT

Palabras clave: Lignina; Química Computacional

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

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

Química Teórica

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

Ciudad: Montevideo/Uruguay

Proyecto financiado. 2007-2009 PDT Responsable científico: Dra. Patricia Saenz Méndez.

Elaboración de proyecto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); RISSO, M.; CERECETTO, H.; GONZÁLEZ, M.

N-Óxido de 1,2,4-Triazina: Síntesis, Evaluación Antitumoral y de Capacidad de Formación de Radicales Libres , 1998 , 24

Institución financiadora: Comisión Sectorial de Investigación Científica-UDELAR-CSIC

Palabras clave: Compuestos heterocíclicos; Radicales libres

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

Ciudad: Montevideo/Uruguay

Proyecto financiado. 1999-2001 CSIC Iniciación Responsables científicos: Dra. Patricia Saenz Méndez - I.Q. Mariela Risso

Informe o Pericia técnica

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); ERIKSSON, L. A.

Elementary reactions of relevance for the autooxidation (AO) process. Production of hydrogen peroxide , Estudio computacional con altos niveles de teoría para optimizar el proceso de producción de peróxido de hidrógeno , 2007 , 40 , 12

Institución financiadora: EKA Chemicals (Bohus, Suecia)

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

Medio de divulgación: Papel; *Disponibilidad:* Restricta; *Ciudad:* Örebro/Suecia

Informe sujeto a confidencialidad. Contrato de investigación con EKA Chemicals (AB R&D Pulp & Paper Division). Se ha explorado la química redox de quinonas empleadas en la producción de peróxido de hidrógeno con el objetivo de desarrollar un proceso más eficiente a nivel industrial.

Otros

Desarrollo de material didáctico o de instrucción

Diseño y mantenimiento del sitio web del Departamento de Química Orgánica , 2002

Uruguay , Español , Internet , <http://dqp.fq.edu.uy>

Diseño del material multimedia, actualización y consultas online (desde 2001 a la actualidad)

Palabras clave: portal web

Areas del conocimiento: Ingeniería y Tecnología / Otras Ingenierías y Tecnologías / Otras Ingenierías y Tecnologías / Diseño web

Información adicional: 2002-2014

Desarrollo de material didáctico o de instrucción

Técnicas computacionales en el descubrimiento de medicamentos , 1999

Uruguay , Español , Papel

Elaboración del material bibliográfico y ejercicios computacionales

Palabras clave: Diseño de Fármacos; Química Computacional

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

Organización de eventos

Congreso / Organización

XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (Quitel 2016) , 2016

Uruguay , Español , Otros , <http://quitel2016.org.uy/en/>

Duración: 1 semanas

Evento itinerante: SI, *Catálogo:* SI

Radisson Victoria Plaza Hotel , Montevideo

Institución Promotora/Financiadora: Facultad de Química - Facultad de Ciencias - Institut Pasteur Montevideo

Palabras clave: Química Computacional; Biología computacional

Información adicional: Congreso arbitrado, internacional, frecuencia anual. Integrante del del comité científico (conjuntamente con otros investigadores, ver sitio web). Participación como moderadora en sesiones orales, como evaluadora de los trabajos (abstracts) a ser presentados y como juez para definir el premio a mejor poster del congreso.

Sistema Nacional de Investigadores

Organización de eventos

Congreso / Organización

Encuentro Nacional de Ciencias Química - ENAQUI 3.0 , 2013

Uruguay , Español , Otros , <http://www.enaqui.fq.edu.uy/>

Duración: 1 semanas

Evento itinerante: NO, *Catálogo:* NO

Torre de la Telecomunicaciones (Antel) , Montevideo

Institución Promotora/Financiadora: PEDECIBA

Palabras clave: Ciencias Químicas

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

Información adicional: Congreso arbitrado, nacional, realizado cada 2 años. Organización del evento realizado en 2013. Integrante del comité organizador y del comité científico (conjuntamente con otros investigadores, ver sitio web)

Organización de eventos

Congreso / Organización

IV Encuentro Regional de Biocatálisis y Biotransformaciones , 2009

Uruguay , Español , Otros , <http://www.enrebb2010.fq.edu.uy>

Duración: 1 semanas

Evento itinerante: NO, *Catálogo:* NO

Montevideo , Montevideo

Institución Promotora/Financiadora: Universidad de la República

Palabras clave: Biocatálisis; Biotransformaciones; Biotecnología

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente / Ciencias Medioambientales / Biotecnología

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

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

Información adicional: Congreso arbitrado, regional-iberoamericano, realizado cada 2 años. Organización del evento realizado en diciembre de 2010. Integrante del comité organizador y del comité científico (conjuntamente con otros investigadores, ver sitio web)

Otra producción técnica

¿Qué es la biocatálisis? , 2010

Uruguay , Español , Película Video

Video de divulgación científica. Filmado en el marco del proyecto

Facultad de Química , Montevideo

Institución Promotora/Financiadora: ANII

Palabras clave: Biocatálisis

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

Otra producción técnica

Taller Nacional de Planificación Estratégica de la Biotecnología para el Sector Agropecuario , 2009

Uruguay , Español , Internet , http://www.mincyt.gov.ar/web_biotech/biotecsur.html

Identificar de manera consensuada entre un grupo seleccionado de representantes nacionales vinculados al sector agropecuario, las líneas estratégicas nacionales en el área de biotecnologías

IIBCE , Montevideo

Institución Promotora/Financiadora: Mercosur-Biotech

Palabras clave: Biotecnología; Sector Agropecuario

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente / Ciencias Medioambientales / Biotecnología

Información adicional: El taller tuvo como objetivos identificar y priorizar, de manera consensuada entre un grupo seleccionado de representantes de los distintos sectores (académico, privado y público) nacionales vinculados al sector agropecuario, las estrategias nacionales a desarrollar en el área de biotecnologías; y seleccionar los representantes nacionales que participarán en el Seminario Regional (dos representantes por el sector académico, dos por el privado y uno por el público). Designación como representante nacional en el Seminario Regional.

Otra producción técnica

Seminario Regional de Planificación Estratégica de la Biotecnología para el Sector Agropecuario , 2009

Argentina , Español , Internet , http://www.mincyt.gov.ar/web_biotech/biotecsurl.html

Identificar de manera consensuada entre un grupo seleccionado de representantes del MERCOSUR vinculados al sector agropecuario, las líneas estratégicas regionales en el área de biotecnologías

Hotel Castelar , Buenos Aires

Institución Promotora/Financiadora: Mercosur-Biotech

Palabras clave: Biotecnología; Sector Agropecuario

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente / Ciencias Medioambientales / Biotecnología

Información adicional: Representante por Uruguay del sector académico y presentación oral de los resultados del Taller Nacional. La autoría de los resultados corresponde a varios actores vinculados al sector tecnológico. La exposición final de los resultados corresponde a la Dra. Patricia Saenz Méndez.

Otra producción técnica

Taller para la identificación de demandas de investigación en biotecnologías para la cadena forestal , 2008

Uruguay , Español , Papel , http://www.mincyt.gov.ar/web_biotech/biotecsurl.html

Identificar y priorizar, de manera consensuada entre un grupo seleccionado de representantes nacionales vinculados a la cadena forestal, las demandas nacionales en el área de biotecnologías

LATU , Montevideo

Institución Promotora/Financiadora: Mercosur-Biotech

Palabras clave: Biotecnología; Cadena productiva forestal

Áreas del conocimiento: Ingeniería y Tecnología / Biotecnología del Medio Ambiente / Biotecnología Medioambiental / Sector forestal

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

Información adicional: En el taller se generó un informe de la cadena forestal de Uruguay. Los 25 participantes realizaron una priorización de determinadas áreas para presentar el informe en el seminario regional. Adicionalmente, se seleccionaron 5 representantes nacionales: Patricia Saenz Méndez (sector académico), Elena Beyhaut (sector académico), Mary Lopretti (sector público), Zhora Bennadji (coordinador técnico), Dan Piestun (líder científico), José García de León (sector privado) y Heraldo Yannuzzi (sector privado).

Otra producción técnica

Seminario regional para determinar las demandas de investigación en biotecnologías para la cadena forestal , 2008

Argentina , Español , Internet , http://www.mincyt.gov.ar/web_biotech/biotecsurl.html

Determinación de las demandas en biotecnología para realizar la convocatoria a proyectos integrados del Mercosur

INTA , Buenos Aires

Institución Promotora/Financiadora: Mercosur-Biotech

Palabras clave: Biotecnología; Cadena productiva forestal

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

Información adicional: En el taller se identificaron las demandas regionales para la cadena forestal con el objetivo de establecer los objetivos y lineamientos generales de la convocatoria a proyectos integrados en la cadena forestal. Actuación como representante por Uruguay del sector académico.

Otra producción técnica

Diseño y mantenimiento del sitio web del Grupo de Físicoquímica Orgánica y Bioprocesos , 2008

Uruguay , Español , Internet , <http://gfob.fq.edu.uy/>

Diseño del material multimedia, actualización y consultas online (desde 2008)

Uruguay , Montevideo

Palabras clave: portal web

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

Información adicional: 2008-2014

Evaluaciones

Evaluación de Proyectos

2017

Institución financiadora: Subcomisión de Iniciación a la Investigación

Cantidad: Mas de 20

Evaluación de Proyectos

2015

Institución financiadora: Proyecto de Dedicación Total (solicitado por la Comisión Central de Dedicación Total)

Cantidad: Menos de 5

Universidad de la República

Evaluador externo de solicitud de ingreso a la Dedicación Total (a pedido de la Comisión Central de Dedicación Total)

Evaluación de Proyectos

2011 / 2017

Institución financiadora: Comisión Sectorial de Investigación Científica

Cantidad: De 5 a 20

Comisión Sectorial de Investigación Científica , Uruguay

Convocatoria: Proyectos de Iniciación a la Investigación. Evaluación en las convocatorias 2011, 2013, 2015 y 2017

Evaluación de Proyectos

2009 / 2011

Institución financiadora: FONCYT-PICT, Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología

Cantidad: Menos de 5

FONCYT-PICT, Ministerio de Educación, Ciencia y Tecnología , Argentina

Proyectos de Investigación (República Argentina). Evaluación en las convocatorias 2009, 2010 y 2011.

Evaluación de Eventos

2016

Nombre: XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina,

Facultad de Química - UdelaR

Evaluación de Resúmenes a ser presentados en el evento. Integrante del comité científico

Evaluación de Eventos

2013

Nombre: ENAQUI 3.0 Encuentro Nacional de Ciencias Químicas,

Facultad de Química

Evaluación de resúmenes como integrante del Comité Científico del evento

Evaluación de Eventos

2010

Nombre: Cuarto Encuentro Regional de Biocatálisis y Biotransformaciones,

Facultad de Química - UdelaR , Uruguay

Evaluación de resúmenes como integrante del Comité Científico del evento

Evaluación de Publicaciones

2017

Nombre: Molecules,

Cantidad: Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2017

Nombre: Journal of Molecular Modeling,

Cantidad: Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2017

Nombre: Recent Innovations in Chemical Engineering,

Cantidad: Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2013 / 2017

Nombre: Journal of Organic Chemistry,

Cantidad: De 5 a 20

Evaluación de Publicaciones

2013

Nombre: Molecular Informatics,

Cantidad: Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2012

Nombre: Biochemistry,

Cantidad: Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2011 / 2016

Nombre: Journal of Biophysical Chemistry,

Cantidad: De 5 a 20

Evaluación de Publicaciones

2011

Nombre: International Journal of Molecular Sciences,

Cantidad: Menos de 5

Evaluación de Publicaciones

2010 / 2011

Nombre: Theoretical Chemistry Accounts,

Cantidad: De 5 a 20

Evaluación de Publicaciones

2009

Nombre: Letters in Organic Chemistry,

Cantidad: Menos de 5

Evaluación de Premios

2016

Nombre: Premio al mejor Poster. QUITEL 2016 (XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión LATuna),

Cantidad: Mas de 20

Facultad de Química - Facultad de Ciencias - Institut Pasteur de Montevideo

Sistema Nacional de Investigadores

Sistema Nacional de Investigadores

Evaluación de Convocatorias Concursables

2016

Nombre: Becas de Posgrados Nacionales - Áreas Estratégicas 2016,

Cantidad: Menos de 5

ANII

Evaluador de Becas de Posgrado

Evaluación de Convocatorias Concursables

2013

Nombre: Becas de Movilidad Tipo Capacitación,

Cantidad: Menos de 5

Agencia Nacional de Investigación e Innovación

Actuación como evaluadora externa en 2013

Formación de RRHH

Tutorías concluidas

Posgrado

Sistema Nacional de Investigadores

Tesis de doctorado

Recuperación de productos químicos de alto valor agregado a partir de lignina Kraft. Preparación de modelos de lignina y estructuras relacionadas con potencial sintético , 2015

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Virginia Aldabalde

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

Palabras clave: Lignina; Productos de alto valor agregado; Antioxidantes; Polifenoles

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

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

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

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

Información adicional: Tesis de posgrado en la línea de investigación principal de la postulante. Tesis co-dirigida con la Dra. Daniela Gamenara y el Dr. Gustavo Seoane. Tesis de Doctorado, salto a tesis de doctorado realizado en setiembre 2011. BECA de Maestría ANII (convocatoria 2010) (BE_POS_2010_1_2610). BECA de Doctorado ANII (convocatoria 2011) (POS_2011_1_3678). Defensa de Tesis: 27 de marzo de 2015.

Tesis de maestría

Lignanós como bloques de construcción. Funcionalización de olefinas deficientes en electrones mediante reacciones de epoxidación y posterior apertura , 2014

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Mariela Risso

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

Palabras clave: Lignanós; Epoxidaciones enzimáticas; Biotransformaciones

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

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

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

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

Información adicional: Tesis de posgrado en la línea de investigación principal de la postulante. Tesis co-dirigida con la Dra. Daniela Gamenara. Defensa de Tesis prevista para primer semestre de 2014. Ingreso al Régimen de Dedicación Total en 2013. Defensa de Tesis: 12 de diciembre de 2014

Grado

Tesis/Monografía de grado

Estudios mecanísticos y sintéticos de la preparación quimio- y estereoelectiva de fragmento C22-C27 de Laulimalida e Isolaulimalida , 2013

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Gastón Pais

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Licenciatura en Química

Palabras clave: Antitumorales; Tubulina; Hetero-Diels-Alder

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

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

Pais/Idioma: Uruguay/Español

Información adicional: Co-Tutor: Prof. Gustavo Seoane

Docente adscriptor/Practicantado

Diseño computacional de reacciones multicomponente y dominó para la síntesis de productos naturales y farmacéuticos , 2011

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Eduardo Bermúdez

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay

Palabras clave: Reacciones Multicomponente; Reacciones Dominó; Química Computacional

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

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

Pais/Idioma: Uruguay/Español

Información adicional: Trabajo final de carrera (Químico), Practicantado de Facultad de Química

Docente adscriptor/Practicantado

Estudio computacional de la especificidad por sustrato de la proteína FTO asociada al riesgo de obesidad , 2011

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Maitia Labora

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay

Palabras clave: Proteína FTO; Obesidad; Docking

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

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

Diseño racional de Fármacos

Pais/Idioma: Uruguay/Español

Información adicional: Trabajo final de carrera (Química Farmacéutica), Practicantado de Facultad de Química

Otras

Iniciación a la investigación

Motivos recurrentes en productos bioactivos: síntesis, predicción del perfil de actividad biológica e identificación basada en el ligando de nuevos compuestos con actividad biológica definida , 2013

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Claudia Martínez

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay

Palabras clave: Reacciones Multicomponente; Reacciones Dominó

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

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

Información adicional: Mariela Risso participa en la orientación de la Becaria Claudia Martínez está contratada por el Proyecto CSIC I+D N° 809 (Responsable: Dra. Patricia Saenz Méndez) desde 2013.

Iniciación a la investigación

Estudio computacional de la oxidación de cisteínas con peróxido de hidrógeno , 2012

Tipo de orientación: Cotutor o Asesor

Nombre del orientado: Camila Lacroze

Palabras clave: Oxidación de Moléculas de Interés Biológico; Peróxido de hidrógeno

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: Tutor: Oscar N. Ventura. Trabajo en el marco del Proyecto de Grupos CSIC

Iniciación a la investigación

Estudio de reacciones multicomponente y dominó , 2012

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Aní Balemián

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay

Palabras clave: Reacciones Multicomponente; Reacciones Dominó

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

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

Iniciación a la investigación

Diseño computacional de reacciones multicomponente y dominó para la síntesis de productos naturales y farmacéuticos , 2010

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Eduardo Bermúdez

Universidad de la República , Uruguay

Palabras clave: Reacciones Multicomponente; Reacciones Dominó; Química Computacional

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

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

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

Información adicional: BECA DE INICIACIÓN ANII (BE_INI_2010_2054). Tutor: Patricia Saenz Méndez

Iniciación a la investigación

Modificación quimioenzimática de residuos forestoindustriales. Obtención de polifenoles con potencial actividad curtiente , 2010

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: María Lucía Derrudi

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay

Palabras clave: Biocatálisis; Lignina; Residuos forestales

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

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

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

Información adicional: BECA DE INICIACIÓN ANII (BE_INI_2010_2107). Tutor: Patricia Saenz Méndez

Iniciación a la investigación

Síntesis de potenciales antioxidantes mediante reacciones organocatalizadas , 2009

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Federico Geymonat Rodríguez

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay

Palabras clave: Síntesis orgánica; Organocatálisis

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

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

Iniciación a la investigación

Estudio teórico de la reacción organocatalizada de Knoevenagel-Doebner , 2009

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Eduardo Bermúdez

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay

Palabras clave: Lignanos; Mecanismos de Reacción; Organocatálisis

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

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

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

Iniciación a la investigación

Síntesis de bloques de construcción quirales mediante aproximaciones quimioenzimáticas , 2009

Nombre del orientado: Ignacio Guarnieri

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Síntesis orgánica avanzada

Palabras clave: Síntesis orgánica

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

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

Iniciación a la investigación

Reacciones de apertura de epóxidos derivados de cis-ciclohexadienodoles , 2009

Nombre del orientado: Gabriela Texeira

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay , Síntesis orgánica avanzada

Palabras clave: Síntesis orgánica

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

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

Iniciación a la investigación

Estudio teórico de la estructura y reactividad de lignanos como potenciales agentes oxidantes , 2009

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Camila Lacroze

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay

Palabras clave: Lignanos; Antioxidantes; Mecanismos de Reacción

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

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

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

Iniciación a la investigación

Obtención de productos de alto valor agregado a partir de lignina mediante biotransformaciones , 2008

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: María Lucía Derrudi

Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay

Palabras clave: Lignina; Productos químicos de alto valor agregado; Biotecnología

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

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

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

Información adicional: 2008-2009

Información adicional: Co-dirección: Prof. Leif A. Eriksson (University of Gothenburg). Beca de Maestría ANII (Convocatoria 2012): POS_NAC_2012_1_9152 Presentación Oral Intermedia de la Carrera de Posgrado: 22 de agosto de 2014. Beca de Doctorado ANII (Convocatoria 2014): POS_NAC_2014_1_102859

Otros datos relevantes

Premios y títulos

2008 Investigador G3, PEDECIBA (Nacional) PEDECIBA-QUÍMICA

2009 Investigador Nivel I, Sistema Nacional de Investigadores (Nacional) ANII

1998 Becaria de Maestría PEDECIBA-QUÍMICA

2002 Becaria de Doctorado PEDECIBA-QUÍMICA

2007 Becaria de posdoctorado Örebro Universitet, EKA Chemicals

2009 Integrante de la nómina de Directores de Tesis de la Facultad de Química. Facultad de Química, UdelaR.

2009 Delegada Regional por Uruguay (Internacional) Sociedad Argentina de Investigación en Síntesis Orgánica

2009-2013 Delegada por Uruguay

2011 Investigador Nivel I, Sistema Nacional de Investigadores (Nacional) ANII

2014 Investigador Nivel I, Sistema Nacional de Investigadores (Nacional) ANII

2015 Invited Researcher (Internacional) Unión Europea, Marie Curie (FP/7)

Incluye gastos de viaje, gastos de investigación (inversiones, gastos de asistencia a congresos, cursos y formación académica personal, compra de software hardware)

2016 Investigador G4, PEDECIBA (Nacional) PEDECIBA-QUÍMICA

Jurado/Integrante de comisiones evaluadoras de trabajos académicos

Tesis

Candidato: Carolina Fontana

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); BURTON, G.; BROVETTO, M.; MANTA, E.; MOYNA, G.

Estudios Sintéticos, Estructurales y Biológicos de Análogos Funcional y Topológicamente Simplificados de Metabolitos Marinos. , 2009

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

Referencias adicionales: Uruguay , Español

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

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

Tesis

Candidato: Carmina Reyes

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Licuefacción de Madera de Eucalipto y Pino por Métodos Hidrotérmicos , 2016

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

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: Química de la madera

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

Tesis

Candidato: Elena Alvareda

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); MOMBRÚ, A.; VÁZQUEZ, M.

Relación estructura-actividad de polifenoles: desarrollo y aplicación de técnicas de farmacología molecular y estudios de unión a blancos involucrados en los mecanismos de acción , 2014

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

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: Polifenoles; Farmacología molecular

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

Tesis

Candidato: Jorge Rodríguez

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); TERÁN, M.; FAGIOLINO, P.

I+D de análogos e la vitamina E liberadores de óxido nítrico como potenciales fármacos para prevención primaria de aterosclerosis , 2013

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

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: Síntesis orgánica

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

Tesis

Candidato: Larissa Gioia

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); SOUBES, M.; BATISTA, F.

Producción, Caracterización e inmovilización de laccasas para uso en Biocatálisis y Biorremediación , 2012

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

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: Laccasas

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

Tesis

Candidato: Edvin Erdtman

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); BRINK, T.; LAAKSONEN, A.

5-Aminolevulinic acid and derivatives thereof. Properties, lipid permeability and enzymatic reactions , 2010

Tesis (PhD Postgraduate program) - Örebro Universitet - Suecia

Referencias adicionales: Suecia , Inglés

Palabras clave: 5-Aminolevulinic acid; Tautomerization; Photodynamic therapy; Enzyme mechanism

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

Tesis

Candidato: Maitia Labora

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007); PILLI, R.; HEINZEN, H.

Aproximación quimioenzimática a la síntesis total de epoxienonas quirales naturales , 2010

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

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: Epoxienonas

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

Candidato: Federico Ortiz

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

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

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

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: Química Computacional

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

Candidato: Florencia Ferraro

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Búsqueda de inhibidores de cisteína proteasas esenciales del parásito Fasciola hepatica como potenciales fármacos , 2015

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

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: Síntesis orgánica

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

Candidato: Florencia Klein

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Estudio de la glicación temprana de histona H1 , 2015

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

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: Química Computacional

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

Candidato: Elena Aguilera

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Síntesis y evaluación biológica de productos activos frente a Trypanosoma cruzi con capacidad de inhibición de TcTIM , 2014

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

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: Síntesis orgánica

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

Candidato: Victoria Veroli

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Interacciones entre el ácido nitroaraquidónico y elreceptos nuclear PPAR γ : calibración de un modelo computacional para predecir su actividad como agonistas , 2014

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

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: Química Computacional

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

Candidato: Marcos Couto

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Diseño, síntesis y evaluación biológica de compuestos híbridos ditioiltiona-flavonoide como potenciales agentes inductores de Quinona reductasa y Glutación S-transferasa en quimiopreención del cáncer , 2013

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

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: Síntesis orgánica

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

Candidato: Catherine Fagundez

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Estudio de metodologías de obtención de 1,3-oxa(tia)zoles y su aplicación en la síntesis de análogos de productos naturales bioactivos , 2012

(Licenciatura en Química) - Facultad de Química - UDeLaR - Uruguay

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: Síntesis orgánica

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

Candidato: Ari Zeida

SAENZ MÉNDEZ, P. (SAENZ, P. EN ANTERIORES A 2007)

Licenciatura en Bioquímica , 2011

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

Referencias adicionales: Uruguay , Español

Palabras clave: ADN; Course Grain

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

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

Presentaciones en eventos

Congreso

'Magic shotgun' for bacterial toxins: an inverse docking study for multi-target drug discovery , 2016

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

Referencias adicionales: Suecia; *Nombre del evento:* ISQBP (International Society of Quantum Biology and Pharmacology) President's Meeting 2016; *Nombre de la institución promotora:* University of Bergen

Palabras clave: Inverse docking; Antibiotics; Resistant pathogens

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

Congreso

Structural insights into human microsomal epoxide hydrolase , 2016

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 40

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2016); *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Química - Facultad de Ciencias - Institut Pasteur de Montevideo

Palabras clave: Epoxide hydrolase; Anticonvulsant agents; Homology Models

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

Congreso

Generación del trisacárido galactopiranosil- β -D-(1-X)-glucopiranosil- β -D-(1-4)-glucopiranosido como potencial inhibidor de galectina-1 , 2016

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

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* EnREBB VII - SiLaBB II;

Palabras clave: Glicosidasas; Galectinas

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

Presentador del poster: Cecilia Porciúncula Autores: Cecilia Porciúncula-González, Gabriela Irazoqui, Cecilia Giacomini y Patricia Saenz-Méndez

Congreso

New targets for new antibiotics: in silico prediction of potential Sortase A inhibitors , 2016

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

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2016); *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Química - Facultad de Ciencias - Institut Pasteur de Montevideo

Palabras clave: Antibióticos

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

Presentador del poster: Eduardo Bermudez Autores: Eduardo Bermudez, Leif A. Eriksson, Patricia Saenz-Méndez

Congreso

An approach to diphtheria toxin and eukaryotic elongation factor 2 interaction model , 2016

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

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2016); *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Química - Facultad de Ciencias - Institut Pasteur de Montevideo

Palabras clave: Antibióticos

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

Presentador del poster: Eduardo Bermudez Autores: Eduardo Bermudez, Patricia Saenz-Méndez, Leif A. Eriksson

Congreso

Determination of the best DFT method to describe protonated epoxides , 2016

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

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2016); *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Química - Facultad de Ciencias - Institut Pasteur de Montevideo

Palabras clave: Epóxidos; DFT

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

Presentador del poster: Aline Katz Autores: Aline Katz, Patricia Saenz-Méndez, Oscar N. Ventura

Congreso

Microsecond molecular dynamics study of insulin , 2016

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

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* XLII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 2016); *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Química - Facultad de Ciencias - Institut Pasteur de Montevideo

Palabras clave: Insulina; Dinámica Molecular

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

Presentador del poster: Aline Katz Autores: Aline Katz, Oscar Olvera-Neria, Ana C. Estrada-Real, Julio C. González-Torres, Enrique Poulain, Víctor D. Domínguez-Soria, Patricia Saenz-Méndez, Oscar N. Ventura

Congreso

Elongation factor 2 diphthamide unit: Unique, essential, and vulnerable , 2015

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 30

Referencias adicionales: Estados Unidos; *Nombre del evento:* 2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies - Pacificchem; *Nombre de la institución promotora:* American Chemical Society, Canadian Society for Chemistry, Chemical Society of Japan, New Zealand Institute of Chemistry, Royal Australian Chemical Institute, Korean Chemical Society, Chinese Chemical Society

Palabras clave: Antibiotics

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

Congreso

Aplicación de estrategias teórico-experimentales para la generación de galactósidos con actividad inhibidora de galectina-1 , 2015

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

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* ENAQUI 4; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA-Química

Palabras clave: Galectinas

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

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

Presentador del poster: Cecilia Porciúncula Autores: Cecilia Porciúncula-González, Gabriela Irazoqui, Patricia Saenz Méndez, Cecilia Giacomini

Congreso

Nuevos blancos para nuevos antibióticos: Predicción in silico de potenciales inhibidores de Sortasa A , 2015

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

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* ENAQUI 4; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA-Química

Palabras clave: Antibióticos

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

Presentador del poster: Eduardo Bermudez Autores: Eduardo Bermudez, Leif A. Eriksson, Patricia Saenz Méndez

Congreso

Síntesis de derivados tetrahidropiran-2-ona a través de reacciones Knoevenagel-hetero-Diels-Alder , 2015

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

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* ENAQUI 4; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA-Química

Palabras clave: Reacciones dominó y multicomponente

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

Presentador del poster: Mariela Risso Autores: Mariela Risso, Claudia Martínez, Patricia Saenz Méndez

Congreso

Profundización en el estudio del modelo conformacional de la enzima epóxido hidrolasa microsomal , 2015

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

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* ENAQUI 4; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA-Química

Palabras clave: Epoxido hidrolasa; Anticonvulsivantes; Modelado por homología

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

Presentador del poster: Aline Katz Autores: Aline Katz, Oscar N. Ventura, Patricia Saenz Méndez

Congreso

Modelo por homología de ciclohexanona monooxigenasa de Acinetobacter calcoaceticus basado en moldes múltiples , 2013

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* ENAQUI 3.0 Encuentro Nacional de Ciencias Químicas; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA-Química

Palabras clave: Ciclohexanona monooxigenasa; Modelado por homología

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

Presentador del poster: Eduardo Bermúdez Autores: Eduardo Bermúdez, Oscar N. Ventura, Leif A. Eriksson, Patricia Saenz Méndez

Congreso

Lignanos como bloques de construcción. Epoxidación de olefinas deficientes en electrones , 2013

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* ENAQUI 3.0 Encuentro Nacional de Ciencias Químicas; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA-Química

Palabras clave: Fenilglicidatos; Organocatálisis

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

Presentador del poster: Mariela Risso Autores: Mariela Risso, Daniela Gamenara, Gustavo Seoane, Patricia Saenz Méndez

Congreso

Estudio de la oxidación de la Cys215 en la PTP1B , 2013

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* ENAQUI 3.0 Encuentro Nacional de Ciencias Químicas; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA-Química

Palabras clave: Protein Tyrosine Phosphatase

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

Presentador del poster: Aline Katz Autores: Aline Katz, Patricia Saenz Méndez, Oscar N. Ventura

Congreso

Fraccionamiento de lignina Kraft. Identificación y caracterización mediante RMN de ¹H, ¹³C y HSQC , 2013

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* ENAQUI 3.0 Encuentro Nacional de Ciencias Químicas; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA-Química

Palabras clave: Lignina

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

Presentador oral: Virginia Aldabalde Autores: Virginia Aldabalde, Daniela Gamenara, Gustavo Seoane, Patricia Saenz Méndez

Congreso

Estudio teórico de la protonación del sitio activo de la dehaloperoxidasa A , 2013

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* ENAQUI 3.0 Encuentro Nacional de Ciencias Químicas; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA-Química

Palabras clave: Dehaloperoxidasa

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

Presentador oral: Fiorentina Bottinelli Autores: Fiorentina Bottinelli, Patricia Saenz Méndez, Oscar N. Ventura

Congreso

Ciclohexanona monooxigenasa de *Acinetobacter calcoaceticus*: modelo por homología basado en moldes múltiples , 2012

Tipo de participación: Poster,

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

Palabras clave: Ciclohexanona monooxigenasa; Modelado por homología

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

Presentador del póster: Patricia Saenz Méndez Autores: Patricia Saenz-Méndez, Eduardo Bermúdez, Oscar N. Ventura y Leif A. Eriksson

Congreso

Estudio de la oxidación de la Cys215 en la enzima proteína tirosina fosfatasa humana PTP1B , 2012

Tipo de participación: Poster,

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

Palabras clave: Protein Tyrosine Phosphatase

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

Presentador del poster: Aline Katz Autores: Aline Katz, Patricia Saenz-Méndez y Oscar N. Ventura

Congreso

Bio- and organocatalytic epoxidation of electron poor olefins , 2012

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

Referencias adicionales: Brasil; *Nombre del evento:* 4th International IUPAC Conference on Green Chemistry; *Nombre de la institución promotora:* IUPAC

Palabras clave: Química Verde; Fenilglicidatos; Organocatálisis

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

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

Presentador del poster: Mariela Risso Autores: Mariela Risso, Daniela Gamenara, Gustavo Seoane, Patricia Saenz Méndez

Congreso

Kraft lignin as renewable resource of high added-value chemicals , 2012

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

Referencias adicionales: Brasil; *Nombre del evento:* 4th International IUPAC Conference on Green Chemistry; *Nombre de la institución promotora:* IUPAC

Palabras clave: Lignina; Biocatálisis; Fuentes renovables; Química Verde; Biorrefinerías

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

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

Presentador del poster: Virginia Aldabalde Autores: Virginia Aldabalde, Daniela Gamenara, Gustavo Seoane, Patricia Saenz Méndez

Congreso

Insights into the structural basis of microtubule stabilizing antitumoral agents (MSAAs) activity. Prediction of the binding modes of Taxol and Laulimalide , 2011

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

Referencias adicionales: España; *Nombre del evento:* Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011; *Nombre de la institución promotora:* Universidad de Santiago de Compostela

Palabras clave: Laulimalide; Taxol; Tubulin

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

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

Presentador del poster: Patricia Saenz Méndez Autores: Patricia Saenz Méndez, Gastón Pais, Gustavo Seoane, Oscar N. Ventura

Congreso

Computational study on how protonation changes affect some structural factors of Dehaloperoxidase A , 2011

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

Referencias adicionales: España; *Nombre del evento:* Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011; *Nombre de la institución promotora:* Universidad de Santiago de Compostela

Palabras clave: Dehaloperoxidase

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

Presentador del poster: Fiorentina Bottinelli Autores: Fiorentina Bottinelli, Patricia Saenz Méndez, Oscar N. Ventura

Congreso

Determination of chloride, bromide and iodide ions parameters for use in molecular simulations of TIP3P compatible solvated systems with CHARMM27 force field , 2011

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

Referencias adicionales: España; *Nombre del evento:* Ninth Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists, WATOC 2011; *Nombre de la institución promotora:* Universidad de Santiago de Compostela

Palabras clave: CHARMM27; PTP1B

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

Presentador del poster: Aline Katz Autores: Aline Katz, Patricia Saenz Méndez, Alexandra Cousido-Siah, Andre Mitschler, Alberto Podjarny, Oscar N. Ventura

Congreso

Estudio computacional de la oxidación de tiolatos con peróxido de hidrógeno como modelo del rol de cisteínas en oxidorreductasas , 2011

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

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Química - ENAQUI 2011; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA-Química

Palabras clave: Cisteínas; Peróxido de hidrógeno

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

Presentador del poster: Camila Lacroze Autores: Camila Lacroze, Patricia Saenz Méndez, Oscar N. Ventura.

Congreso

Análisis de los factores estructurales responsables de la actividad de agentes estabilizadores de microtúbulos (MSAA). Predicción de los sitios de unión de Taxol y de Laulimalida , 2011

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

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Química - ENAQUI 2011; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA-Química

Palabras clave: Tubulina; Taxol; Laulimalida

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

Presentador del poster: Gastón Pais Autores: Gastón Pais, Gustavo Seoane, Oscar N. Ventura y Patricia Saenz Méndez

Congreso

Diseño computacional de reacciones multicomponente para la síntesis de motivos estructurales recurrentes en productos naturales , 2011

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

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Química - ENAQUI 2011; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA-Química

Palabras clave: Multicomponente; Organocatálisis

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

Presentador del poster: Eduardo Bermúdez Autores: Eduardo Bermúdez, Oscar N. Ventura, Patricia Saenz Méndez

Congreso

Epoxidación organocatalítica de aldehídos alfa,beta-insaturados , 2011

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

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Química - ENAQUI 2011; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA-Química

Palabras clave: Organocatálisis; Epoxidación; Fenilglicidatos

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

Presentador del poster: Mariela Risso Autores: Mariela Risso, Daniela Gamenara, Gustavo Seoane, Patricia Saenz Méndez

Congreso

Síntesis de modelos de lignina y estructuras relacionadas con potencial sintético , 2011

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

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Química - ENAQUI 2011; *Nombre de la institución promotora:* PEDECIBA-Química

Palabras clave: Lignina; Modelos; Biocatálisis

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

Presentador del poster: Virginia Aldabalde Autores: Virginia Aldabalde, Laura Franco Fraguas, Gustavo Seoane, Daniela Gamenara, Patricia Saenz Méndez

Congreso

Diseño computacional de reacciones multicomponente para la síntesis de productos naturales y farmacéuticos , 2011

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

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

Palabras clave: Organocatálisis; Multicomponente

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

Presentador del poster: Eduardo Bermúdez Autores: Eduardo Bermúdez, Oscar N. Ventura, Patricia Saenz Méndez

Congreso

Síntesis de modelos de lignina , 2011

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

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* XVIII Simposio Nacional de Química Orgánica - SINAQO 2011; *Nombre de la institución promotora:* SAIQO

Palabras clave: Modelos; Lignina; Biocatálisis

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

Presentador del poster: Virginia Aldabalde Autores: Virginia Aldabalde, Laura Franco Fraguas, Daniela Gamenara, Gustavo Seoane, Patricia Saenz Méndez

Congreso

Epoxidación organocatalítica de aldehídos alfa,beta-insaturados , 2011

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

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

Palabras clave: Epoxidación; Organocatálisis; Fenilglicidatos

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

Presentador del poster: Mariela Risso Autores: Mariela Risso, Daniela Gamenara, Gustavo Seoane, Patricia Saenz Méndez

Congreso

Estudio computacional de la especificidad por sustrato de la proteína FTO asociada al riesgo de obesidad , 2011

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

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

Palabras clave: Proteína FTO; Nucleósidos; Docking molecular

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

Presentador del poster: Patricia Saenz Méndez Autores: Patricia Saenz Méndez, Maitia Labora, Aline Katz, Oscar N. Ventura

Congreso

The Reaction Mechanism of Dehaloperoxidase , 2010

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 15

Referencias adicionales: Irlanda; *Nombre del evento:* High Performance Computing at the Chemistry/Biochemistry Interface - ICI (Institute of Chemistry of Ireland) Annual Conference; *Nombre de la institución promotora:* National University of Galway

Palabras clave: Dehaloperoxidase; Enzyme mechanism

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

Congreso

Catalysis in the synthesis of insect pheromones: Preparation of Dominicalure I, sexual pheromone of *Rhyzopertha dominica* , 2010

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

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* First Latin American Meeting of Chemical Ecology; *Nombre de la institución promotora:* Asociación Latinoamericana de Ecología Química (ALAEQ)

Palabras clave: Pheromones; Catalysis

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

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

Presentador oral: Estefanía Dibello Autores: Estefanía Dibello, María Lucía Derrudi, Gustavo Seoane, Patricia Saenz Méndez, Daniela Gamemara

Congreso

Transesterificación de b-cetoésteres catalizada por lipasas y asistida por irradiación de microondas en ausencia de disolventes , 2010

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* IV Encuentro Regional de Biocatálisis y Biotransformaciones;

Palabras clave: Lipasas; Microondas

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

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

Presentador oral: Mariela Risso Autores: Mariela Risso, Mauro Mazzini, Patricia Saenz Méndez, Gustavo Seoane, Daniela Gamemara

Congreso

Síntesis de modelos de lignina utilizando peroxidases y laccasas , 2010

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* IV Encuentro Regional de Biocatálisis y Biotransformaciones;

Palabras clave: Lignina; peroxidases; Laccasas

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

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

Presentador del poster: Virginia Aldabalde Autores: Virginia Aldabalde, Laura Franco Fraguas, Gustavo Seoane, Daniela Gamemara, Patricia Saenz Méndez

Congreso

Estudio DFT de un mecanismo alternativo de apertura de epóxidos con eterato de trifluoruro de boro para dar syn-fluorohidrinan , 2009

Tipo de participación: Expositor, *Carga horaria:* 10

Referencias adicionales: Colombia; *Nombre del evento:* QUITEL-2009-XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina; *Nombre de la institución promotora:* Universidad Nacional de Colombia, Universidad Nacional de Antioquía

Palabras clave: Apertura de epóxidos; Mecanismos de Reacción; Físicoquímica orgánica

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Mecanismos de Reacción

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

Química Computacional

Autores: Patricia Saenz Méndez, Gustavo Seoane, Oscar N. Ventura. Congreso internacional, arbitrado.

Congreso

Estudio experimental y computacional de reacciones químicas del ácido peroxocarbónico con subproductos de descomposición de la lignina en CO₂ supercrítico , 2009

Tipo de participación: Expositor, *Carga horaria:* 10

Referencias adicionales: Colombia; *Nombre del evento:* QUITEL-2009-XXXV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina; *Nombre de la institución promotora:* Universidad Nacional de Colombia, Universidad Nacional de Antioquía

Palabras clave: CO₂ supercrítico; Lignina; Productos de alto valor agregado

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

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

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

Autores: Patricia Saenz Méndez, Virginia Aldabalde, Oscar N. Ventura. Congreso internacional, arbitrado.

Congreso

Enzymatic approaches for the synthesis of insect pheromones , 2009

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Brasil; *Nombre del evento:* 13th Brazilian Meeting on Organic Synthesis (BMOS); *Nombre de la institución promotora:* Brazilian Chemical Society

Palabras clave: Feromonas; Síntesis orgánica

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

Autores: Silvana Ravía, Leticia Alves, Ignacio Guarnieri, Mariela Risso, Mónica Santos, Santiago Kröger, Carmen Rossini, Andrés González, Gustavo Seoane, Silvana Vero, Patricia Saenz Méndez, Daniela Gamenara. Congreso nacional brasileiro, bianual, arbitrado.

Congreso

Microwave assisted and solvent free lipase-catalyzed transesterification of beta-keto-esters , 2009

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Suiza; *Nombre del evento:* Biotrans 2009. 9th International Symposium on Biocatalysis and Biotransformations; *Nombre de la institución promotora:* Bern University

Palabras clave: Biocatálisis; Lipasas; Microondas

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

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

Autores: Risso, M.; Seoane, G.; Saenz Méndez, P.; Gamenara, D. Congreso Internacional, bianual, arbitrado.

Congreso

Enzymatic epoxidations of lignans as a valuable tool for the preparation of key building blocks , 2009

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Suiza; *Nombre del evento:* Biotrans 2009. 9th International Symposium on Biocatalysis and Biotransformations; *Nombre de la institución promotora:* Bern University

Palabras clave: Lignanos; Epoxidaciones enzimáticas

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

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

Autores: Risso, M.; Aldabalde, V.; Alves, L.; Derrudi, L.; Geymonat, F.; Maggio, I.; Pandolfi, E.; Seoane, G.; Gamenara, D.; Saenz Méndez, P. Congreso Internacional, bianual, arbitrado.

Congreso

Reacciones de transesterificación catalizadas por lipasas en sistemas sin disolvente y mediante irradiación por microondas , 2009

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* XVII-Simposio Nacional de Química Orgánica; *Nombre de la institución promotora:* SAIQO

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

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

Autores: Mauro Mazzini, Mariela Risso, Patricia Saenz Méndez, Gustavo Seoane, Daniela Gamenara. Congreso nacional argentino, bianual, arbitrado.

Congreso

Aproximación enzimática a la síntesis de Dominicalure I y II, componentes de la feromona sexual de *Rhyzopertha dominica* , 2009

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* XVII-Simposio Nacional de Química Orgánica; *Nombre de la institución promotora:* SAIQO

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

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

Autores: Ignacio Guarnieri, Leticia Alves, Mónica Santos, Gustavo Seoane, Patricia Saenz Méndez, Daniela Gamenara Congreso nacional argentino, bianual, arbitrado

Congreso

Estudio teórico de la biosíntesis de la lignina , 2009

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* XVII-Simposio Nacional de Química Orgánica; *Nombre de la institución promotora:* SAIQO

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

Autores: Patricia Saenz Méndez, Oscar N. Ventura Congreso nacional argentino, bianual, arbitrado

Congreso

Lignanos como bloques de construcción. Epoxidación química y enzimática de olefinas deficientes en electrones , 2009

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* XVII-Simposio Nacional de Química Orgánica; *Nombre de la institución promotora:* SAIQO

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

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

Autores: Mariela Risso, Federico Geymonat, María Lucía Derrudi, Virginia Aldabalde, Leticia Alves, Gustavo Seoane, Daniela Gamemara, Patricia Saenz Méndez. Congreso nacional argentino, bianual, arbitrado

Congreso

Lignina Kraft: purificación, caracterización y recuperación de productos de alto valor agregado , 2009

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* XVII-Simposio Nacional de Química Orgánica; *Nombre de la institución promotora:* SAIQO

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

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

Autores: Virginia Aldabalde, María Lucía Derrudi, Gustavo Seoane, Daniela Gamemara, Patricia Saenz Méndez. Congreso nacional argentino, bianual, arbitrado

Congreso

Efecto de las condiciones en el curso de la reacción descarboxilativa de Knoevenagel , 2009

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* XVII-Simposio Nacional de Química Orgánica; *Nombre de la institución promotora:* SAIQO

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

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

Autores: Federico Geymonat, Virginia Aldabalde, María Lucía Derrudi, Daniela Gamemara, Gustavo Seoane, Patricia Saenz Méndez. Congreso nacional argentino, bianual, arbitrado

Congreso

Síntesis organocatalítica eficiente de precursores de fenilglicidatos funcionalizados , 2009

Tipo de participación: Poster,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* XVII-Simposio Nacional de Química Orgánica; *Nombre de la institución promotora:* SAIQO

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

Autores: María Lucía Derrudi, Federico Geymonat, Virginia Aldabalde, Daniela Gamemara, Gustavo Seoane, Patricia Saenz Méndez. Congreso nacional argentino, bianual, arbitrado

Congreso

Epoxidación química y enzimática de lignanos , 2009

Tipo de participación: Poster,

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

Palabras clave: Epóxidos; Lignanos

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

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

Presentador del poster: Mariela Risso Autores: Mariela Risso, Gustavo Seoane, Daniela Gamemara, Patricia Saenz Méndez

Congreso

Recuperación de productos químicos de alto valor agregado a partir de lignina Kraft. Preparación de modelos de lignina y estructuras relacionadas con potencial sintético (póster) , 2009

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

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

Palabras clave: Lignina; Productos químicos de alto valor agregado

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

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

Presentador: Virginia Aldabalde Autores: Virginia Aldabalde, María Lucía Derrudi, Gustavo Seoane, Daniela Gamemara, Patricia Saenz Méndez

Congreso

Modeling furocoumarin intercalation in DNA (Conferencia Invitada) , 2007

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Suecia; *Nombre del evento:* First Annual Theoretical Chemistry Symposium; *Nombre de la institución promotora:* Swedish Chemical Society

Palabras clave: Terapia fotodinámica; ADN; Docking molecular

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de fármacos

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

Congreso nacional sueco, anual, arbitrado.

Congreso

Modeling furocoumarin intercalation in DNA (póster) , 2007

Tipo de participación: Expositor,

Referencias adicionales: República Checa; *Nombre del evento:* Modeling Interactions in Biomolecules III; *Nombre de la institución promotora:* Univerzita Karlova

Palabras clave: ADN; Furocumarinas; Intercalación

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de fármacos

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

Autores: Patricia Saenz Méndez, Rita Guedes, Daniel dos Santos, Lei A. Eriksson. Congreso internacional, arbitrado.

Congreso

Oligociclitos. Desde los bloques quirales hacia la construcción de nuevas arquitecturas tridimensionales (Exposición Oral) , 2005

Tipo de participación: Expositor,

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

Palabras clave: Síntesis orgánica; Físicoquímica orgánica; Ciclitos

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

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

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

Autores: Patricia Saenz Méndez (orador), Oscar N. Ventura, Gustavo Seoane. Trabajo seleccionado para exposición oral.

Congreso

Ring-opening reactions of vinyl epoxides as a synthetic route to oligomers of cyclitols (Exposición oral y póster) , 2005

Tipo de participación: Expositor,

Referencias adicionales: Brasil; *Nombre del evento:* 11th Brazilian Meeting on Organic Synthesis; *Nombre de la institución promotora:* The Brazilian Chemical Society-Federal University of Santa Maria

Palabras clave: Ciclitos; Apertura de epóxidos; Síntesis orgánica estereoselectiva

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

Autores: Patricia Saenz Méndez (orador), Oscar N. Ventura, Gustavo Seoane. Exposición oral (trabajo seleccionado) y póster. Congreso nacional brasilero, bianual, arbitrado.

Congreso

Estudio preliminar de la superficie de energía potencial del H₂CSO₂ (póster) , 2002

Tipo de participación: Expositor,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina; *Nombre de la institución promotora:* Facultad de Química

Palabras clave: Química Computacional

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

Autores: Patricia Saenz, Oscar N. Ventura. Congreso internacional, arbitrado.

Congreso

Estudio teórico de la reactividad de 5,6-dimetil-N4-óxido-1,2,4-triazina frente a diferentes electrófilos (póster) , 2001

Tipo de participación: Expositor,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* XII-Simposio Nacional de Química Orgánica. "Dr. Eduardo G. Gros; *Nombre de la institución promotora:* SAIQO

Palabras clave: Compuestos heterocíclicos

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Modelado Molecular

Autores: Hugo Cerecetto, Mercedes González, Patricia Saenz. Congreso nacional argentino, bianual, arbitrado.

Congreso

Modificaciones químicas de sistemas N-óxido y N,N'-dióxido de 1,2,4-triazina como agentes citotóxicos en condiciones de hipoxia (póster) , 2001

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* XII-Simposio Nacional de Química Orgánica. "Dr. Eduardo G. Gros; *Nombre de la institución promotora:* SAIQO

Palabras clave: Compuestos heterocíclicos

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

Autores: Cerecetto, H.; González, M.; Risso, M.; Saenz, P.; Ezpeleta, O.; López de Ceráin, A.; Monge, A. Congreso nacional argentino, bianual, arbitrado.

Congreso

Solvatocromismo de análogos estructurales de betaínas de piridinio (póster) , 2001

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* XII-Simposio Nacional de Química Orgánica. "Dr. Eduardo G. Gros; *Nombre de la institución promotora:* SAIQO

Palabras clave: Efecto solvatocrómico

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

Autores: L. Fernández, M. Santo, L. Giacomelli, R. Cattana, J.J. Silver, M. González, H. Cerecetto, P. Saenz. Congreso nacional argentino, bianual, arbitrado.

Congreso

Modelado molecular como herramienta didáctica en un curso de grado de Química Orgánica (póster) , 2001

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Segundas Jornadas Internacionales de Enseñanza Universitaria de la Química;

Palabras clave: Modelado Molecular

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

Autores: M. Boiani, M. Brovetto, R. Di Maio, H. Cerecetto, M. González, V. López, P. Saenz, V. Schapiro, G. Seoane, M. Míguez, S. Lodeiro, J. Otegui.

Congreso

Estudio electroquímico y de afinidad a ADN de derivados de N-óxido y N,N'-dióxido de 1,2,4-triazina con potencial actividad citotóxica selectiva en condiciones de hipoxia (póster) , 2000

Tipo de participación: Otros,

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

Palabras clave: ADN; Compuestos heterocíclicos

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

Autores: Hugo Cerecetto, Mariela Risso, Patricia Saenz, Gustavo Seoane, Mercedes González, Claudio Olea-Azar, Ana M. Bruno

Congreso

Generación electroquímica, biológica y caracterización por resonancia de espín electrónico (ree) de radicales libres derivados de familias de N-óxidos con potencialidad antiparasitaria (póster) , 2000

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Perú; *Nombre del evento:* XXIV Congreso Latinoamericano de Química. XXI Congreso Peruano de Química;

Palabras clave: Compuestos heterocíclicos; Radicales libres; Resonancia de espín electrónico

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

Autores: C. Olea-azar, R. Briones, C. Moncada, A. Morello, F. Mendizabal, H. Cerecetto, M. Gonzalez, M. Risso, R. Di maio, S. Onetto, P. Saenz, M. Bioni, G. Seoane

Congreso

Estudio de la relación entre la estructura y el potencial de mono-electronación de derivados de 1,2,4-triazina N4-óxido y N1, N4-dióxido (póster) , 2000

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Perú; *Nombre del evento:* XXIV Congreso Latinoamericano de Química. XXI Congreso Peruano de Química;

Palabras clave: Potencial de mono-electronación

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Relación estructura-actividad

Autores: Hugo Cerecetto, Mercedes González, Silvia Onetto, Mariela Risso, Patricia Saenz, Gustavo Seoane, Jaime Alarcón, Claudio Olea-Azar

Congreso

Uso de horno microondas doméstico en reacciones orgánicas (póster) , 2000

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Perú; *Nombre del evento:* XXIV Congreso Latinoamericano de Química. XXI Congreso Peruano de Química;

Palabras clave: Microondas

Areas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica con microondas

Autores: Eliana Cabrera, Hugo Cerecetto, Rossana di Maio, Mercedes González, Silvia Onetto, Patricia Saenz, Gustavo Seoane

Congreso

Enfoque metodológico alternativo en los cursos prácticos de química orgánica (póster) , 2000

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* II Congreso Iberoamericano de Educación en Ciencias Experimentales;

Palabras clave: Química Orgánica

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

Autores: Cátedra de Química Orgánica, UNADEQ

Congreso

De novo design of cholinomimetic drugs: a new family of acetylcholinesterase inhibitors (Exposición oral) , 1999

Tipo de participación: Otros,

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

Palabras clave: Química Médica

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

Autores: Ana Castro (orador), Patricia Saenz, Concepción Pérez, Paul D. Lyne, W. Graham Richards, Ana Martínez. Congreso español, arbitrado.

Congreso

Estudio de la reactividad de 5,6-dimetil- y 3,5,6-trimetil N-óxido-1,2,4-triazina frente a diferentes electrófilos (póster) , 1999

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* XII-Simposio Nacional de Química Orgánica. "Dr. Eduardo Guerreiro; *Nombre de la institución promotora:* SAIQO

Palabras clave: Compuestos heterocíclicos

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

Autores: Cerecetto, H.; González, M.; Saenz, P.; Seoane, G. Congreso nacional argentino, bianual, arbitrado.

Congreso

Synthesis of 1,2,4-triazine N-oxides derivatives. Evaluation as hypoxia-selective cytotoxins. Part III (póster) , 1999

Tipo de participación: Otros,

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

Palabras clave: Compuestos heterocíclicos; Citotoxinas selectivas en hipoxia; Compuestos antitumorales

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

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

Autores: H. Cerecetto, M. González, P. Saenz, G. Seoane, O. Ezpeleta, A. López de Ceráin, A. Monge. Congreso español, arbitrado.

Congreso

Aplicación de técnicas de dinámica grupal al curso práctico de química orgánica: una experiencia piloto (póster) , 1999

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* 4tas jornadas nacionales y 1eras internacionales de enseñanza universitaria de la química;

Palabras clave: Química Orgánica

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

Autores: Cátedra de Química Orgánica

Congreso

Modificaciones estructurales de la cadena lateral de alquil-1,2,4-triazinas N4-óxido (Exposición oral) , 1998

Tipo de participación: Expositor,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* VI Jornadas de Investigación del Grupo Montevideo; *Nombre de la institución promotora:* Universidades del Grupo Montevideo

Palabras clave: Compuestos heterocíclicos

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

Autores: Patricia Saenz (orador), Hugo Cerecetto, Mercedes González. Congreso regional, anual, arbitrado.

Congreso

Synthesis of 1,2,4-triazine N-oxides derivatives. Evaluation as potential hypoxia-selective cytotoxins (póster) , 1998

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Escocia; *Nombre del evento:* XVth International Symposium on Medicinal Chemistry;

Palabras clave: Citotoxinas selectivas en hipoxia; Compuestos heterocíclicos

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

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

Autores: H. Cerecetto, M. González, S. Onetto, P. Saenz, G. Seoane, O. Espeleta, A. López de Ceráin, A. Monge

Congreso

Estudios de ¹H-RMN vs T para derivados del heterociclo benzo[1,2-c]-1,2,5-oxadiazol N-óxido (póster) , 1998

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* XXII Congreso Argentino de Química;

Palabras clave: RMN; Compuestos heterocíclicos

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

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

Autores: H. Cerecetto, R. Di maio, M. González, S. Pacce, P. Saenz, G. Sagrera, G. Seoane

Congreso

Deoxygenation of 1,2,5-ozadiazole N-oxides derivatives. Part II. Reduction in acid medium (póster) , 1998

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Brasil; *Nombre del evento:* 8 th Brazilian Meeting on Organic Synthesis (8 th BMOS); *Nombre de la institución promotora:* The Brazilian Chemical Society

Palabras clave: Compuestos heterocíclicos

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

Autores: H. Cerecetto, R. Di maio, M. González, M. Risso, P. Saenz, G. Seoane

Congreso

Modificaciones estructurales de N1-óxido de benzo [1,2-c]-1,2,5-oxadiazol. Diseño, síntesis y evaluación como potenciales herbicidas (Exposición oral) , 1997

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Paraguay; *Nombre del evento:* V Jornadas de Investigación del Grupo Montevideo; *Nombre de la institución promotora:* Universidades del Grupo Montevideo

Palabras clave: Compuestos heterocíclicos

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

Autores: Hugo Cerecetto, Eduardo Días (orador), Mercedes González, Sandra Pacce, Patricia Saenz, Gustavo Seoane, Grisel Fernández, Juana Villalba. Congreso regional, anual, arbitrado.

Congreso

Dihidroxilación de ciclohexadienodios quirales: preparación enantioselectiva de sintones altamente funcionalizados (póster) , 1997

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* XI Simposio de Investigadores Argentinos en Química Orgánica; *Nombre de la institución promotora:* SAIQO

Palabras clave: ciclohexadienodios; Biotransformaciones

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

Autores: G. Seoane, V. Schapiro, M. Brovetto, G. Cavalli, P. Saenz, C. Charrié, A. Sierra

Congreso

Ciclohexadienodios quirales como sintones de compuestos polioxigenados (póster) , 1997

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* XI Simposio de Investigadores Argentinos en Química Orgánica;

Palabras clave: ciclohexadienodios; Biotransformaciones

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

Autores: G. Seoane, V. Schapiro, A. Sierra, G. Cavalli, P. Saenz, C. Charrié, P. Padilla, M. Pardo

Congreso

Reducción selectiva del óxido en sistemas heterocíclicos derivados de N-óxido de 1,2,5-oxadiazol (póster) , 1997

Tipo de participación: Otros,

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* XI Simposio de Investigadores Argentinos en Química Orgánica; *Nombre de la institución promotora:* SAIQO

Palabras clave: Compuestos heterocíclicos

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

Autores: H. Cerecetto, M. González, S. Onetto, M. Risso, P. Saenz, G. Seoane, F. Zinola, C. Olea-azar

Congreso

Síntesis y evaluación de N-óxidos de aminas heterocíclicas aromáticas como potenciales antichagásicos. Modulación de derivados de N-óxido de benzo[1,2-c]-1,2,5-oxadiazol (póster) , 1997

Tipo de participación: Otros,

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

Palabras clave: Agentes antichagásicos; Compuestos heterocíclicos

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

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

Autores: H. Cerecetto, E. Dias, R. Di Maio, M. Risso, P. Saenz, G. Seoane, G. Peluffo, C. Quijano, A. Denicola

Congreso

Síntesis y actividad antihelmíntica in vitro de derivados de N-óxido de 1,2,5-oxadiazol (póster) , 1997

Tipo de participación: Otros,

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

Palabras clave: Actividad antihelmíntica; Compuestos heterocíclicos

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

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

Autores: H. Cerecetto, E. Dias, M. González, R. Di Maio, S. Onetto, S. Pacce, P. Saenz, G. Seoane, L. Domínguez, J. Saldaña

Congreso

N-óxidos de aminas heterocíclicas aromáticas biológicamente activos. Estudio de la relación entre las propiedades fisicoquímicas y la actividad (póster) , 1997

Tipo de participación: Otros,

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

Palabras clave: Compuestos heterocíclicos; Propiedades fisicoquímicas; Actividad biológica

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

Autores: H. Cerecetto, E. Dias, M. González, R. Di maio, S. Onetto, S. Pacce, M. Risso, P. Saenz, G. Seoane, G. Peluffo, C. Quijano, A. Denicola, G. Fernández, J. Villalba, F. Zinola, J. Alarcón, C. Olea-Azar

Seminario

'Magic shotgun' for bacterial toxins: an inverse docking study for multi-target drug discovery , 2016

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 2

Referencias adicionales: Suecia; *Nombre del evento:* Biochemistry Seminars; *Nombre de la institución promotora:* University of Gothenburg

Palabras clave: Inverse docking; multi-target drug design; Antibiotics

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

Seminario

Catalysis in action: bridging gaps with computational chemistry , 2013

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Suecia; *Nombre del evento:* Monthly Seminars of the Chemistry Department; *Nombre de la institución promotora:* Goteborg Universitet

Palabras clave: Catalysis

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

Seminario

Industria de Fabricación de Pulpa de Celulosa (Conferencia Invitada) , 2009

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 6

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Jornadas de actualización docente; *Nombre de la institución promotora:* Centros Regionales de Profesores (CERP), ANEP-CODICEN, Colonia

Palabras clave: Procesos Industriales; Síntesis orgánica

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Fabricación de pulpa de

celulosa

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

Seminario

Biosíntesis y degradación de lignina. Obtención de sustancias químicas útiles a partir de biomasa (Conferencia Invitada) , 2008

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Seminarios del Departamento de Química Orgánica (SEMIQO); *Nombre de la institución promotora:* Departamento de Química Orgánica

Palabras clave: Lignina; Productos químicos de alto valor agregado; Biotecnología; Celulosa; Química Orgánica

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

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

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

Resumen de la exposición: El desarrollo de procesos que permitan la producción sustentable de materiales a partir de fuentes naturales renovables, es un desafío significativo. La materia constitutiva de los vegetales, o biomasa, y en particular la lignina constituye una materia prima reciclable que puede explotarse sin agotar los recursos del planeta. Esto enfatiza la necesidad de desarrollar nuevos procesos ambientalmente amigables que permitan convertir la vasta fuente de lignina en productos útiles, como ser polímeros, disolventes, precursores sintéticos y aditivos empleados en las industrias alimentaria y farmacéutica. La investigación desarrollada se concentra en la oxidación química, así como en la utilización de enzimas y microorganismos para la conversión de la lignina presente en el licor negro, una materia prima de bajo valor, en bloques de construcción y productos químicos de alto valor agregado.

Seminario

Sistema Nacional de Investigadores

DNA binders: unraveling the recognition by small molecules (Conferencia Invitada) , 2007

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Suecia; *Nombre del evento:* Örebro Life Science Center Meetings; *Nombre de la institución promotora:* Örebro Life Science Center

Palabras clave: Terapia fotodinámica; ADN; Docking molecular; Furocumarinas

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de fármacos

Seminario

Physical-Chemical and Synthetical Aspects of Chiral Cyclohexadienediols Oligomerization (Conferencia Invitada) , 2007

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Suecia; *Nombre del evento:* Natural Sciences Department Meetings; *Nombre de la institución promotora:* Natural Sciences Department, Örebro University

Palabras clave: Ciclitoles; Físicoquímica orgánica; Síntesis orgánica; DFT; Química Computacional

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

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

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

Química Computacional

Seminario

Biocatálisis aplicada a la construcción diastereoselectiva de sintones quirales y a la síntesis total de moléculas objetivo (Conferencia Invitada) , 2005

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* Seminarios del Departamento de Química Orgánica (SEMIQO); *Nombre de la institución promotora:* Departamento de Química Orgánica

Palabras clave: Biocatálisis; Perhidrólisis de ácidos carboxílicos; Lipasas; Epoxidaciones estereoselectivas; Reacciones de Baeyer-Villiger

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

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

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

Simposio

Design of Environmentally Friendly Processes for the Preparation of High-opportunity Chemicals for the Pharmaceutical and Materials Industries , 2012

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

Referencias adicionales: Estados Unidos; *Nombre del evento:* American Chemical Society Summer School on Green Chemistry; *Nombre de la institución promotora:* American Chemical Society-Colorado School of Mines

Palabras clave: Green Chemistry; Computational Chemistry

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

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

Presentador del poster: Eduardo Bermúdez Autores: Eduardo Bermúdez, Oscar N. Ventura, Leif A. Eriksson, Patricia Saenz Méndez

Simposio

Recovery of high value-added chemicals from Kraft lignin , 2009

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

Referencias adicionales: Estados Unidos; *Nombre del evento:* American Chemical Society Summer School on Green Chemistry; *Nombre de la institución promotora:* American Chemical Society-Colorado School of Mines

Palabras clave: Química Verde; Biorrefinerías; Lignina; Fuentes renovables

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

Presentador del poster: Virginia Aldabalde AUtores: Virginia Aldabalde, Daniela Gamenara, Patricia Saenz Méndez

Simposio

Computational study on the molecular basis of furocoumarins photochemotherapy (Conferencia Invitada) , 2007

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Grecia; *Nombre del evento:* Second Swedish-Hellenic Life Sciences Research Conference; *Nombre de la institución promotora:* National Hellenic Research Foundation - Örebro Life Science Center

Palabras clave: Terapia fotodinámica; ADN; Furocoumarinas; Docking molecular

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

Química Computacional

Simposio

Synthetic and Physicochemical Aspects of Oligomerization of Chiral Cyclohexadienols (póster) , 2005

Tipo de participación: Expositor,

Referencias adicionales: Canadá; *Nombre del evento:* American Chemical Society Summer School on Green Chemistry; *Nombre de la institución promotora:* American Chemical Society-McGill University

Palabras clave: ciclohexadienodios; Físicoquímica orgánica

Áreas del conocimiento: Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis orgánica
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Físicoquímica Orgánica

Autores: Patricia Saenz, Oscar N. Ventura, Gustavo Seoane. Evento internacional, anual, arbitrado.

Taller

Computational Chemistry and Biology Group: I+D and Network Opportunities , 2015

Tipo de participación: Conferencista Invitado, *Carga horaria:* 16

Referencias adicionales: Uruguay; *Nombre del evento:* South American PIs (Principal Investigators) in Molecular Simulations; *Nombre de la institución promotora:* Institut Pasteur Montevideo

Palabras clave: Molecular Simulations

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

Taller

Biología en el sector agropecuario de Uruguay. Líneas Estratégicas (exposición oral invitada representando a Uruguay) , 2009

Tipo de participación: Expositor, *Carga horaria:* 10

Referencias adicionales: Argentina; *Nombre del evento:* Seminario Regional de Planificación Estratégica para el Sector Agropecuario, Apoyo al desarrollo de la biotecnología en el MERCOSUR-BIOTECH; *Nombre de la institución promotora:* BIOTEC SUR

Palabras clave: Biotecnología, Sector Agropecuario

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

Seleccionada para presentar los resultados del Taller Nacional en el Taller Regional realizado en Buenos Aires. Representante por el Sector Académico de Uruguay.

Encuentro

Sequence selectivity of DNA-furocoumarin complexes (Conferencia invitada) , 2007

Tipo de participación: Conferencista Invitado,

Referencias adicionales: Alemania; *Nombre del evento:* Fifth European Chemical Computing Group User Group Meeting 2007; *Nombre de la institución promotora:* Chemical Computing Group

Palabras clave: Terapia fotodinámica; ADN; Docking molecular; Furocoumarinas

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Diseño de fármacos

Evento anual, dictado de conferencias por invitación.

Indicadores de producción

Producción bibliográfica	41
Artículos publicados en revistas científicas	32

Completo (Arbitrada)	32
<i>Artículos aceptados para publicación en revistas científicas</i>	<u>1</u>
Completo (Arbitrada)	1
<i>Trabajos en eventos</i>	<u>3</u>
Resumen (No Arbitrada)	2
Resumen expandido (No Arbitrada)	1
<i>Libros y capítulos de libros publicados</i>	<u>5</u>
Libro publicado	1
Capítulo de libro publicado	4
<i>Textos en periódicos</i>	<u>0</u>
<i>Documentos de trabajo</i>	<u>0</u>
<i>Producción técnica</i>	<u>44</u>
<i>Productos tecnológicos</i>	<u>0</u>
<i>Procesos o técnicas</i>	<u>0</u>
<i>Trabajos técnicos</i>	<u>33</u>
<i>Otros tipos</i>	<u>11</u>
<i>Evaluaciones</i>	<u>20</u>
Evaluación de Proyectos	4
Evaluación de Eventos	3
Evaluación de Publicaciones	10
Evaluación de Premios	1
Evaluación de Convocatorias Concursables	2
<i>Formación de RRHH</i>	<u>21</u>
<i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</i>	<u>19</u>
Tesis de maestría	1
Tesis de doctorado	1
Tesis/Monografía de grado	1
Iniciación a la investigación	13
Docente adscriptor/Practicantado	2
Otras tutorías/orientaciones	1
<i>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha</i>	<u>2</u>
Tesis de doctorado	2

Sistema Nacional de Investigadores