



ARI FERNANDO ZEIDA
CAMACHO

Licenciado en Bioquímica

zeidaari@gmail.com
https://www.researchgate.net/profile/Ari_Zeida

SNI

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas
Categorización actual: Nivel I (Asociado)

Fecha de publicación: 15/08/2019
Última actualización: 15/08/2019

Datos Generales

INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad de la República/ Facultad de Medicina - UDeLaR / Departamento de Bioquímica - Centro de Investigaciones Biomédicas (Ceinbio) / Uruguay

DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Universidad de la República / Facultad de Medicina - UDeLaR / Sector Educación Superior/Público

Dirección: Avda Gral Flores 2125 / 11800 / Montevideo , Buenos Aires , Uruguay

Teléfono: (+5411) 29243414

Correo electrónico/Sitio Web: zeidaari@gmail.com

Formación

Formación académica

CONCLUIDA

DOCTORADO

Ciencias Químicas (2011 - 2015)

Universidad de Buenos Aires , Argentina

Título de la disertación/tesis/defensa: Estructura y mecanismo de acción de peroxirredoxinas: estudio teórico y experimental

Obtención del título: 2015

Sitio web de la disertación/tesis/defensa: http://digital.bl.fcen.uba.ar/gsd1-282/cgi-bin/library.cgi?a=d&c=tesis&d=Tesis_5877_ZeidaCamacho

Financiación:

Consejo de Investigaciones Científicas y Técnicas , Argentina

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

GRADO

Licenciatura en Bioquímica (2006 - 2011)

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

Título de la disertación/tesis/defensa:

Obtención del título: 2011

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Profesorado de Matemática (2000 - 2004)

Administración Nacional de Educación Pública - Centro Regional de Profesores , Uruguay

Título de la disertación/tesis/defensa:

Obtención del título: 2004

Palabras Clave: Matemática

Áreas de conocimiento:

Humanidades / Otras Humanidades / Otras Humanidades /

Formación complementaria

CONCLUIDA

POSDOCTORADOS

Caracterización funcional, estructural y dinámica de la peroxidasa Peroxirredoxina Q de *Mycobacterium tuberculosis* (2016 - 2017)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad de Buenos Aires , Argentina

Financiación:

CONICET , Argentina

Areas de conocimiento:

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

CURSOS DE CORTA DURACIÓN

IUBMB/IUPAB Advanced School and Workshop "Protein-Protein and Protein-Membrane Interaction: Experimental and Theoretical Approaches" (10/2018 - 10/2018)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Biología. Universidad de La Habana , Cuba

45 horas

Palabras Clave: Protein-Protein Interaction; Protein Biophysics

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Modern Approaches in Drug Discovery for Neglected Infectious Diseases (01/2014 - 01/2014)

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut

Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay

40 horas

Areas de conocimiento:

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

Herramientas teóricas y experimentales para el estudio de la interacción entre biomoléculas (01/2013 - 01/2013)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Farmacia y Bioquímica , Argentina

90 horas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Redox Chemistry and Biology of Thiols (01/2011 - 01/2011)

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut

Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay

90 horas

Areas de conocimiento:

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

Coarse Grain Methods for Biomolecular Simulations (01/2011 - 01/2011)

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut

Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Theoretical / Practical Course on Molecular Simulations and Design (01/2010 - 01/2010)

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut

Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay

90 horas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

EN MARCHA

POSDOCTORADOS

Mecanismo catalítico de las metionina sulfóxido reductasas de *Mycobacterium tuberculosis* y su interacción con oxidantes celulares (2017)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Medicina - UDeLaR , Uruguay

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Agencia Nacional de Investigación e Innovación , Uruguay

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Idiomas

Inglés

Entiende bien / Habla bien / Lee muy bien / Escribe bien

Áreas de actuación

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Bioquímica

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Biológicas / Biofísica

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

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

Actuación profesional

SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PÚBLICO - UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA - URUGUAY

Facultad de Medicina - UDeLaR

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Becario (10/2017 - a la fecha)

Becario Posdoctoral ,40 horas semanales

Escalafón: Docente

Grado: Grado 3

Cargo: Interino

ACTIVIDADES

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Estructura, dinámica y función de la enzima metionina sulfóxido reductasa B de *Mycobacterium tuberculosis* (04/2018 - a la fecha)

Mycobacterium tuberculosis (Mt) es un patógeno altamente exitoso, capaz de vivir y proliferar en el fagosoma de macrófagos activados, donde es expuesto a especies oxidantes como superóxido, óxido nítrico y distintos peróxidos. Estas especies son capaces de modificar distintas biomoléculas. Es así que el estudio de los sistemas antioxidantes del patógeno resulta de suma importancia para caracterizar los actores y mecanismos moleculares que determinan su extraordinaria capacidad infectiva. En este contexto, la sulfoxidación de residuos de metionina, es una modificación oxidativa reversible implicada en la regulación de la funcionalidad proteica. Mt expresa dos metionina sulfóxido reductasas, MtMsrA y MtMsrB, que reducen los epímeros S y R del sulfóxido de metionina, respectivamente. Para ambas enzimas, el primer paso en la catálisis consiste en la interacción de la metionina-sulfóxido con la cisteína nucleofílica del sitio activo, que resulta oxidada a ácido sulfénico y la liberación de metionina reducida. Los siguientes pasos, que varían según la Msr específica, se encargan de la reducción de la forma oxidada de la enzima a la forma nativa y pueden estar acompañados de grandes cambios conformacionales. La ausencia de estos sistemas antioxidantes implica un aumento de la citotoxicidad causada por especies oxidantes, lo que las convierte en potenciales blancos terapéuticos. Este plan tiene como objetivo central caracterizar integralmente la relación estructura/dinámica-función de la MtMsrB. Esta caracterización se realizará mediante un enfoque multi-disciplinario tanto desde el punto de vista de las técnicas experimentales a utilizar como desde las estrategias teóricas a desarrollarse. Primeramente, se

caracterizará la enzima desde el punto de vista biofísico, con el fin de conocer aspectos microscópicos de la enzima en solución en presencia y ausencia de sustratos. Asimismo, se pretende obtener la estructura cristalográfica de la MtMsrB, que no ha sido reportada hasta el momento. También se caracterizará el sistema desde el punto de vista cinético, y la dependencia de los parámetros catalíticos con el pH y la temperatura. Por último, se utilizarán métodos teóricos de modelado, para determinar las bases moleculares del proceso catalítico. Cabe destacar que aunque el plan de trabajo se realizará en el CEINBIO, FMed-UdeLaR, donde se cuenta con amplia experiencia en sistemas antioxidantes de Mt, el mismo significará la interacción activa con grupos de trabajo en el Institut Pasteur de Montevideo y las Facultades de Farmacia y Bioquímica y de Ciencias Exactas de la Universidad de Buenos Aires.

20 horas semanales

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Financiación:

Dirección de Innovación, Ciencia y Tecnología, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: Ari Fernando ZEIDA CAMACHO , Madia TRUJILLO GARRÉ , Rafael RADÍ ISOLA

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA

Universidad de Buenos Aires / Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Profesor visitante (07/2018 - 08/2018)

Profesor del curso de posgrado: "Escuela de modelado de biomoléculas", 25 horas semanales

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales Universidad de Buenos Aires

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (03/2012 - 02/2018) Trabajo relevante

Ayudante de Primera, 12 horas semanales

ACTIVIDADES

DOCENCIA

Licenciatura en Ciencias Químicas (03/2012 - 02/2018)

Grado

Asistente

Asignaturas:

Química General e Inorgánica, 12 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica /

Doctorado en Ciencias Químicas (06/2016 - 07/2016)

Doctorado

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Simulación computacional avanzada en Química, Bioquímica y Ciencias de Materiales, 40 horas,

Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica /

Doctorado en Ciencias Químicas (06/2013 - 07/2013)

Doctorado

Asistente

Asignaturas:

Simulación computacional avanzada en Química, Bioquímica y Ciencias de Materiales, 40 horas,
Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

EXTENSIÓN

(07/2016 - 07/2016)

FCEN - UBA

10 horas

Áreas de conocimiento:

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

(07/2015 - 07/2015)

FCEN - UBA

10 horas

Áreas de conocimiento:

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

(07/2014 - 07/2014)

FCEN - UBA

10 horas

Áreas de conocimiento:

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

(04/2014 - 05/2014)

FCEN - UBA

5 horas

Áreas de conocimiento:

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

(04/2013 - 06/2013)

FCEN - UBA

5 horas

Áreas de conocimiento:

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

GESTIÓN ACADÉMICA

**Organizador: Primer Workshop Latinoamericano de Modelado Molecular y Simulación Computacional
(06/2016 - 07/2016)**

FCEN - UBA

Gestión de la Enseñanza

Áreas de conocimiento:

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

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA

CONICET

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Becario (03/2016 - 10/2017) Trabajo relevante

Becario Posdoctoral ,40 horas semanales / Dedicación total

Becario (05/2011 - 02/2016) Trabajo relevante

Becario Doctoral ,40 horas semanales / Dedicación total

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Caracterización funcional, estructural y dinámica de la peroxidasa Peroxirredoxina Q de Mycobacterium tuberculosis (03/2016 - a la fecha)

Fundamental
40 horas semanales
IQUIFIB, FFyB - UBA , Integrante del equipo
Equipo:

Estructura y mecanismo de acción de peroxirredoxinas: estudio teórico y experimental (05/2011 - 02/2016)

Fundamental
40 horas semanales
INQUIMAE, FCEN - UBA , Integrante del equipo
Equipo:

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - PARAGUAY

Facultad Politécnica, Universidad Nacional de Asunción

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Profesor visitante (09/2013 - 09/2013)

,20 horas semanales

ACTIVIDADES

DOCENCIA

Didáctica Universitaria (09/2013 - 09/2013)

Doctorado
Invitado
Asignaturas:
Introducción a la Simulación Computacional de Biomoléculas, 20 horas, Teórico-Práctico
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /

SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PÚBLICO - UNIVERSIDAD DE LA REPÚBLICA - URUGUAY

Facultad de Ciencias - UDeLaR

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (07/2008 - 12/2008)

,20 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: Sin horas
Carga horaria de investigación: 40 horas
Carga horaria de formación RRHH: Sin horas
Carga horaria de extensión: Sin horas
Carga horaria de gestión: Sin horas

Producción científica/tecnológica

En el estudio de las ciencias de la vida, particularmente la bioquímica y la medicina, la aplicación de las herramientas de la fisicoquímica y la biología estructural, resulta en la combinación de conceptos de la física, la química y la biología en un intrincado y complejo mosaico que conduce a una comprensión única de los procesos responsables de la vida.

Entre la gran variedad de clases de biomoléculas presentes en los seres vivos, las proteínas juegan un rol principal. Siendo las biomoléculas más versátiles y diversas; las proteínas están en el centro de la acción en los procesos biológicos. Es así que el estudio de las proteínas con las herramientas y fundamentalmente con la visión de la fisicoquímica y la biología estructural, ha constituido un gran aporte en el avance de la descripción de estos sistemas biomoleculares.

En este contexto, las preguntas que intentamos abarcar están directamente vinculadas al comportamiento de proteínas en sistemas

biológicos, incluyendo una perspectiva fisicoquímica y estructural, que permita entender estos fenómenos desde un punto de

vista microscópico. Muchos eventos celulares dependen del funcionamiento de proteínas y por lo tanto, las líneas de investigación contenidas en este espacio multidisciplinario son muchas. En particular, nuestro interés está focalizado en la descripción de las bases moleculares que determinan la capacidad catalítica de enzimas relacionadas con la homeostásis redox de la célula, y cuáles son los mecanismos que subyacen estos procesos.

Producción bibliográfica

ARTÍCULOS PUBLICADOS

ARBITRADOS

A computational investigation of the reactions of tyrosyl, tryptophanyl, and cysteinyl radicals with nitric oxide and molecular oxygen (Completo, 2019)

FN PEDRÓN, BARTESAGHI, S., DA ESTRIN, RADI, R., A. ZEIDA

Free Radical Research, v.: 53 1, p.:18 - 25, 2019

Palabras clave: Amino acid-derived radicals; nitric oxide; one-electron oxidation; oxygen

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 10715762

DOI: [10.1080/10715762.2018.1541322](https://doi.org/10.1080/10715762.2018.1541322)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

From quantum to subcellular scales: multiscale simulation approaches and the SIRAH force field (Completo, 2019)

M. MACHADO, A. ZEIDA, DARRÉ L., PANTANO S.

Interface Focus, v.: 9 3, 2019

Palabras clave: molecular dynamics coarse-grain SIRAH QM/MM/CG hybrid

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Medio de divulgación: Internet

Escrito por invitación

ISSN: 20428898

DOI: [10.1098/rsfs.2018.0085](https://doi.org/10.1098/rsfs.2018.0085)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Gating in plant plasma membrane aquaporins: the involvement of leucine in the formation of a pore constriction in the closed state (Completo, 2019)

CANESSA FORTUNA A., ZERBETTO DE PALMA G., ALIPERTI CAR L., ARMENTIA L., VITALI V.,

A. ZEIDA , ESTRIN DA , ALLEVA K.
FEBS Journal (The), 2019
Palabras clave: aquaporin; gating; leucine plug; molecular dynamics; water transport
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /
Medio de divulgación: Internet
ISSN: 1742464X
DOI: [10.1111/febs.14922](https://doi.org/10.1111/febs.14922)
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Commentary on "Using resonance synchronous spectroscopy to characterize the reactivity and electrophilicity of biologically relevant sulfane sulfur". Evidence that the methodology is inadequate because it only measures unspecific light scattering (Completo, 2019)

CUEVASANTA, E. , BENCHOAM, D , FERRER-SUETA, G. , A. ZEIDA , DENICOLA, A, ALVAREZ, B. , MÖLLER, MN
Redox Biology, 2019
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /
Medio de divulgación: Internet
ISSN: 22132317
DOI: [10.1016/j.redox.2019.101281](https://doi.org/10.1016/j.redox.2019.101281)
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Kinetics of formation and reactivity of the persulfide in the one-cysteine peroxiredoxin from Mycobacterium tuberculosis (Completo, 2019)

CUEVASANTA, E. , ANÍBAL M. REYES , A. ZEIDA , MASTROGIOVANNI, M. , María Inés De Armas , RADI, R , ALVAREZ, B. , TRUJILLO, M.
Journal of Biological Chemistry, 2019
Palabras clave: hydrogen sulfide; persulfide; hydrodisulfide; sulfenic acid peroxiredoxin (Prx); alkyl hydroperoxide reductase E; Mycobacterium tuberculosis; signaling compound; antioxidant defense
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /
Medio de divulgación: Internet
ISSN: 00219258
DOI: [10.1074/jbc.RA119.008883](https://doi.org/10.1074/jbc.RA119.008883)
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Chemical Reactivity and Spectroscopy Explored From QM/MM Molecular Dynamics Simulations Using the LIO Code (Completo, 2018)

J.P. MARCOLONGO , A. ZEIDA , J.A. SEMELAK , N.O. FOGLIA , U.N. MORZÁN , D.A. ESTRIN , M.C. GONZÁLEZ LEBRERO , D.A. SCHERLIS
Frontiers in Chemistry, v.: 6 2018
Palabras clave: QM/MM DFT GPU free energy TDDFT
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Química Teórica y Computacional
Escrito por invitación
ISSN: 2296-2646
DOI: [10.3389/fchem.2018.00070](https://doi.org/10.3389/fchem.2018.00070)

Kinetics, subcellular localization, and contribution to parasite virulence of a Trypanosoma cruzi hybrid type A heme peroxidase (TcAPx-CcP) (Completo, 2017) Trabajo relevante

M HUGO , A. MARTINEZ , M. TRUJILLO , D. ESTRADA , M. MASTROGIOVANNI , E LINARES , O AUGUSTO , F. ISSOGLIO , A. ZEIDA , DA ESTRIN , HF HEIJNEN , L. PIACENZA , R. RADI
Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, v.: 114 8 , 2017
Palabras clave: kinetics Trypanosoma cruzi heme peroxidase virulence oxidants
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /
ISSN: 00278424
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Theoretical investigation of the mechanism of nitroxyl decomposition in aqueous solution (Completo,

2016)

M. BRINGAS, J. SEMELAK, A. ZEIDA, D. A. ESTRIN

Journal of Inorganic Biochemistry, v.: 162 p.:102 - 108, 2016

Palabras clave: Aqueous decomposition Mechanism Nitroxyl QM/MM Reactive nitrogen species

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 01620134

DOI: [10.1016/j.jinorgbio.2016.06.016](https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2016.06.016)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Exploring the Catalytic Mechanism of Human Glutamine Synthetase by Computer Simulations

(Completo, 2016)

F. M. ISSOGLIO, N. CAMPOLO, A. ZEIDA, T. GRUNE, R. RADI, D. A. ESTRIN, S. BARTESAGHI

Biochemistry, v.: 55 42, p.:5907 - 5916, 2016

Palabras clave: Catalytic mechanisms Classical molecular dynamics Glutamine synthetase Reaction

free energy

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00062960

DOI: [10.1021/acs.biochem.6b00822](https://doi.org/10.1021/acs.biochem.6b00822)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

PrxQ B from Mycobacterium tuberculosis is a monomeric, thioredoxin-dependent and highly efficient fatty acid hydroperoxide reductase (Completo, 2016)

ANIBAL M. REYES, D. S. VAZQUEZ, A. ZEIDA, M HUGO, M. D. PIÑEYRO, M. I. DE ARMAS, D. A. ESTRIN, R. RADI, J. SANTOS, M. TRUJILLO

Free Radical Biology and Medicine, v.: 101 p.:249 - 260, 2016

Palabras clave: Mycobacterium tuberculosis Fatty acid hydroperoxides Peroxidatic and resolving cysteine Peroxiredoxin Thiol-dependent peroxidase

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 08915849

DOI: [10.1016/j.freeradbiomed.2016.10.005](https://doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2016.10.005)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Nitrosodisulfide [S₂NO]- (perthionitrite) is a true intermediate during the cross-talk of nitrosyl and sulfide (Completo, 2016)

J. P. MARCOLONGO, U. N. MORZÁN, A. ZEIDA, D. A. SCHERLIS, J. A. OLABE

Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 18 p.:30047 - 30052, 2016

Areas de conocimiento:

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

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 14639076

DOI: [10.1039/C6CP06314D](https://doi.org/10.1039/C6CP06314D)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Molecular Basis of Hydroperoxide Specificity in Peroxiredoxins: The Case of AhpE from Mycobacterium tuberculosis (Completo, 2015)

Trabajo relevante

A. ZEIDA, ANIBAL M. REYES, P. LICHTIG, M HUGO, D. S. VAZQUEZ, J. SANTOS, L. GONZÁLEZ FLECHA, R. RADI, D. A. ESTRIN, M. TRUJILLO

Biochemistry, v.: 54 49, p.:7237 - 7247, 2015

Palabras clave: Peroxiredoxins Mycobacterium tuberculosis Bacterial Proteins Molecular Dynamics Simulation Substrate Specificity

Areas de conocimiento:

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00062960

DOI: [10.1021/acs.biochem.5b00758](https://doi.org/10.1021/acs.biochem.5b00758)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Insights into the mechanism of the reaction between Hydrogen sulfide and peroxyntirite (Completo, 2015)

E. CUEVASANTA , A. ZEIDA , S. CARBALLAL , R. WEEDMAN , U. N. MORZÁN , M. TRUJILLO , R. RADI , D. A. ESTRIN , M. R. FILIPOVIC , B. ALVAREZ

Free Radical Biology and Medicine, v.: 80 2015

Palabras clave: Peroxynitrite hydrogen sulfide kinetics persulfides free radicles

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

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

ISSN: 08915849

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Thiol redox biochemistry: insights from computer simulations (Completo, 2014)

A. ZEIDA , C. M. GUARDIA , P. LICHTIG , L. L. PERISSINOTTI , L. A. DEFELIPE , A. TURJANSKI , R. RADI , M. TRUJILLO , D. A. ESTRIN

Biophysical Reviews, v.: 6 p.:27 - 46, 2014

Palabras clave: Thiols Oxidation Redox homeostasis Computer simulations

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Escrito por invitación

ISSN: 18672450

DOI: [10.1007/s12551-013-0127-x](https://doi.org/10.1007/s12551-013-0127-x)

Scopus®

The Extraordinary Catalytic Ability of Peroxiredoxins: a Combined Experimental and QM/MM Study on the Fast Thiol Oxidation Step (Completo, 2014) Trabajo relevante

A. ZEIDA , ANIBAL M. REYES , M. C. G. LEBRERO , R. RADI , M. TRUJILLO , D. A. ESTRIN

Chemical Communications, v.: 70 p.:10070 - 10073, 2014

Palabras clave: Peroxiredoxins Thiol oxidation Activation parameters QM/MM simulations

Areas de conocimiento:

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

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

ISSN: 13597345

DOI: [10.1039/c4cc02899f](https://doi.org/10.1039/c4cc02899f)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Improving Efficiency in SMD Simulations Through a Hybrid Differential Relaxation Algorithm (Completo, 2014)

C. L. RAMIREZ , A. ZEIDA , G. E. JARA , A. E. ROITBERG , M. A. MARTI

Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 10 p.:4609 - 4617, 2014

Palabras clave: QM/MM simulations

Areas de conocimiento:

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

ISSN: 15499618

DOI: [10.1021/ct500672d](https://doi.org/10.1021/ct500672d)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Mechanism of cysteine oxidation by peroxyntirite: an integrated experimental and theoretical study (Completo, 2013)

A. ZEIDA , M. C. G. LEBRERO , R. RADI , M. TRUJILLO , D. A. ESTRIN

Archives of Biochemistry and Biophysics, v.: 539 p.:81 - 86, 2013

Palabras clave: Thiols Cysteine Peroxynitrite Oxidation SN2 Redox homeostasis

Areas de conocimiento:

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

ISSN: 00039861

DOI: [10.1016/j.abb.2013.08.016](https://doi.org/10.1016/j.abb.2013.08.016)

Assessing the Accuracy of the SIRAH Force Field to Model DNA at Coarse Grain Level (Completo, 2013)

P. D. DANS , L. DARRÉ , M. R. MACHADO , A. ZEIDA , A. F. BRANDNER , PANTANO, S
Lecture Notes in Computer Science, v.: 8213 p.:71 - 81, 2013

Palabras clave: Molecular dynamics nucleic acids simulations WT4 flexibility

Areas de conocimiento:

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

Escrito por invitación

ISSN: 03029743

DOI: [10.1007/978-3-319-02624-4_7](https://doi.org/10.1007/978-3-319-02624-4_7)

Molecular basis of the mechanism of thiol oxidation by hydrogen peroxide in aqueous solution: challenging the SN2 paradigm (Completo, 2012)

A. ZEIDA , R. BABBUSH , GONZALEZ LEBRERO, M. , M. TRUJILLO , R. RADÍ , ESTRIN, D
Chemical Research in Toxicology (E), v.: 25 3 , p.:741 - 746, 2012

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 15205010

DOI: [10.1021/tx200540z](https://doi.org/10.1021/tx200540z)

Breathing, bubbling, and bending: DNA flexibility from multimicrosecond simulations (Completo, 2012)

A. ZEIDA , MACHADO, M. R. , P. D. DANS , PANTANO, S

Physical Review E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, v.: 86 p.:21903 2012

Palabras clave: Molecular dynamics nucleic acids Coarse-grained force field

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 15393755

DOI: [10.1103/PhysRevE.86.021903](https://doi.org/10.1103/PhysRevE.86.021903)

<http://pre.aps.org/abstract/PRE/v86/i2/e021903>

A Coarse Grained Model for Atomic-Detailed DNA Simulations with Explicit Electrostatics (Completo, 2010)

P. D. DANS , A. ZEIDA , MACHADO, M. , PANTANO, S

Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 6 p.:1711 - 1725, 2010

Palabras clave: Acidos nucleicos Coarse-grain Dinámica Molecular

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 15499618

DOI: [10.1021/ct900653p](https://doi.org/10.1021/ct900653p)

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ct900653p>

prevSearch=%255Bauthor%253A%2BDans%252C%2BP.%2BD.%255D

ARTÍCULOS ACEPTADOS

ARBITRADOS

From quantum to subcellular scales: multiscale simulation approaches and the SIRAH force field (Completo, 2019)

M.R. Machado , A. ZEIDA , L. Darré , S. Pantano

Interface Focus, 2019

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica /
Medio de divulgación: Internet
Escrito por invitación
Fecha de aceptación: 07/02/2019
ISSN: 20428898

LIBROS

Hydrogen Peroxide Metabolism in Health and Disease (Participación , 2017)

TRUJILLO, M., S. CARBALLAL, A. ZEIDA, RADI, R
Edición: .
Editorial: Taylor&Francis, Boca Ratón
Tipo de publicación: Investigación
DOI: [10.1201/9781315154831-5](https://doi.org/10.1201/9781315154831-5)
Referado
Escrito por invitación
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /
Medio de divulgación: Papel
ISSN/ISBN: 9781498776158

Capítulos:
Comparative Analysis of Hydrogen Peroxide and Peroxynitrite Reactivity with Thiols
Organizadores: Madia TRUJILLO
Página inicial 49, Página final 79

Advances in Inorganic Chemistry (Participación , 2017)

JP MARCOLONGO, A. ZEIDA, L SLEP, JA OLABE
Edición: .
Editorial: Elsevier, San Diego
Tipo de publicación: Investigación
DOI: [10.1016/bs.adioch.2017.02.002](https://doi.org/10.1016/bs.adioch.2017.02.002)
Referado
Escrito por invitación
Palabras clave: Nitroxyl Thionitrous acid Thionitrite Perthionitrite Nitric oxide Nitrous oxide
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear /
Medio de divulgación: Papel
ISSN/ISBN: 978-0-12-815109-9

Capítulos:
Thionitrous Acid/Thionitrite and Perthionitrite Intermediates in the "Crosstalk" of NO and H₂S
Organizadores: José A. Olabe
Página inicial 277, Página final 309

Evaluaciones

EVALUACIÓN DE PROYECTOS

EVALUACIÓN INDEPENDIENTE DE PROYECTOS

Fondo Clemente Estable 2018 (FCE 2018) (2018 / 2018)

Uruguay
Cantidad: Menos de 5

EVALUACIÓN DE PUBLICACIONES

REVISIONES

Revisor de Free Radical Biology and Medicine (2017)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

EVALUACIÓN DE CONVOCATORIAS CONCURSABLES

Concurso Gr.2 del Laboratorio de Química Teórica y Computacional, FCyEN, Udelar (2018 / 2018)

Comité evaluador
Uruguay
Cantidad: Menos de 5

JURADO DE TESIS

Licenciatura en Bioquímica: "Caracterización cinética de la proteína de fusión TR-Trx-Tpx de Escherichia coli" (2019)

Jurado de mesa de evaluación de tesis
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR ,
Uruguay
Nivel de formación: Grado

Tesina Licenciatura en Bioquímica: "Modificaciones post-traduccionales de la peroxirredoxina 6 humana: consecuencias de su fosforilación y glicación" (2018 / 2018)

Jurado de mesa de evaluación de tesis
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR ,
Uruguay
Nivel de formación: Grado

Formación de RRHH

TUTORÍAS CONCLUIDAS

OTRAS

Bases moleculares de la reactividad de persulfuros y tiolatos frente a peróxido de hidrógeno (2015)

Iniciación a la investigación
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA , Argentina
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad
Nombre del orientado: Jonathan Semelak
País/Idioma: Argentina, Español

Bases moleculares de la reducción de peróxido de hidrógeno por peroxirredoxinas (2014)

Iniciación a la investigación
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - UBA , Argentina
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad
Nombre del orientado: Jonathan Semelak
Medio de divulgación: Internet
País/Idioma: Argentina, Español

TUTORÍAS EN MARCHA

OTRAS

Metionina sulfóxido reductasa A de Mycobacterium tuberculosis: desentrañando los secretos de su ciclo catalítico (2019)

Orientación de posdoctorado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Medicina - UDeLaR /
Departamento de Bioquímica - CEINBIO , Uruguay
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad
Nombre del orientado: Santiago Sastre
Medio de divulgación: Otros
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Mycobacterium tuberculosis metionina sulfóxido reductasabiología redox
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas / Bioquímica

Otros datos relevantes

PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS

Mejor Póster (2018)

(Nacional)
Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular

The Carl Storm International Diversity Fellowship (2014)

(Internacional)
Gordon Conferences

PRESENTACIONES EN EVENTOS

Primer Encuentro Bienal de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular (2018)

Encuentro
Presentación de póster
Uruguay
Tipo de participación: Otros
Nombre de la institución promotora: Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular

Thiol-Based Redox Regulation & Signaling (2018)

Seminario
Catalytic Mechanism of the Methionine Sulfoxide Reductases from Mycobacterium Tuberculosis: Structural, Dynamical and Biochemical Characterization
España
Tipo de participación: Expositor oral
Nombre de la institución promotora: Gordon Research Seminar
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular

Thiol-Based Redox Regulation & Signaling (2018)

Congreso
Catalytic Mechanism of the Methionine Sulfoxide Reductases from Mycobacterium Tuberculosis: Structural, Dynamical and Biochemical Characterization
España
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: Gordon Research Conference
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular

V Latin American Protein Society Meeting (2016)

Congreso
PrxQ B from Mycobacterium tuberculosis is a monomeric, thioredoxin- dependent and highly efficient fatty acid hydroperoxide reductase
Brasil
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40

Thiol Metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions (2015)

Simposio
Exploring the molecular basis of MtAhpE function: reaction mechanism and substrate specificity
Uruguay
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40

Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology. SBF.uy-SAB (2015)

Congreso
Molecular basis of hydroperoxide specificity in peroxiredoxins: studies in AhpE from

Mycobacterium tuberculosis
Uruguay
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40

XLII Annual Meeting of the Brazilian Society for Biochemistry and Molecular Biology (2014)

Congreso
Catalytic ability of peroxiredoxins: an example of the power of biomolecular simulations
Brasil
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40

Thiol-Based Redox Regulation & Signaling (2014)

Congreso
Molecular basis of thiol oxidation by peroxides: aqueous solution and peroxiredoxins
España
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: Gordon Research Conference

Thiol-Based Redox Regulation & Signaling, 2014 (2014)

Seminario
Molecular basis of thiol oxidation by peroxides: aqueous solution and peroxiredoxins
España
Tipo de participación: Expositor oral
Nombre de la institución promotora: Gordon Research Seminar

10th Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemistry (2014)

Congreso
Understanding the Catalytic Ability of Peroxiredoxins: a Combined Experimental and QM/MM Study on the Fast Thiol Oxidation Step
Chile
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40

XVIII Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica (2013)

Congreso
Bases moleculares del mecanismo de oxidación de tioles por peróxidos
Argentina
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40

VIII Meeting of the Society for Free Radical Biology and Medicine - South American Group (2013)

Congreso
Molecular basis of thiol oxidation by peroxides
Argentina
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40

2das Jornadas +Biofísica (2013)

Congreso
Oxidación de tioles por peróxidos: entendiendo a las peroxirredoxinas
Uruguay
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40

II Latin American Federation of Biophysical Societies Congress (2012)

Congreso
Cysteine as a peroxidatic agent: aqueous solution vs. protein environment
Brasil
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40

ISCB Latin America 2012 Conference on Bioinformatics (2012)

Congreso

Molecular basis of the mechanism of thiol oxidation by hydrogen peroxide in aqueous solution: challenging the SN2 paradigm

Chile

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

XL Reunión Anual Sociedad Argentina de Biofísica (2011)

Congreso

Dilucidando el mecanismo molecular de la oxidación de tioles por peróxido de hidrógeno

Argentina

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

1er Congreso Argentino de Bioinformática y Biología Computacional (2010)

Congreso

Development of a Coarse-Grained Model at the base level for DNA Simulations

Argentina

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Asociación Argentina de Bioinformática y Biología Computacional

Palabras Clave: coarse grain model DNA

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Otros Tópicos Biológicos / Biología Computacional

6tas. JORNADAS Sociedad Uruguay de Bioquímica y Biología Molecular (2009)

Congreso

Desarrollo de un modelo de grano-grueso para simulación de ADN

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Sociedad Argentina de Investigación en Bioquímica y Biología Molecular

Congreso

Kinetic and dynamical characterization of an antioxidant system from Mycobacterium Tuberculosis

Argentina

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 40

Indicadores de producción

PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA	24
Artículos publicados en revistas científicas	21
Completo	21
Artículos aceptados para publicación en revistas científicas	1
Completo	1
Libros y Capítulos	2
Capítulos de libro publicado	2
EVALUACIONES	5
Evaluación de proyectos	1
Evaluación de publicaciones	1
Evaluación de convocatorias concursables	1

Jurado de tesis	2
FORMACIÓN RRHH	3
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas	2
Iniciación a la investigación	2
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha	1
Orientación de posdoctorado	1