



FEDERICO PABLO
IRIBARNE RESTUCCIA

Dr

fede@fq.edu.uy

Gral. Flores 2124 CC 1157,
C.P. 11800
29291558

SNI

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

Fecha de publicación: 05/10/2018
Última actualización SNI: 05/10/2018

Datos Generales

INSTITUCIÓN PRINCIPAL

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

DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

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

Dirección: Gral. Flores 2124 / 11800 / Montevideo, Montevideo, Uruguay

Teléfono: (598) 29291558

Correo electrónico/Sitio Web: fede@fq.edu.uy

Formación

Formación académica

CONCLUIDA

DOCTORADO

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (1999 - 2005)

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

Título de la disertación/tesis: Interacciones moleculares de ligandos nitrofuránicos y fenotiazínicos con las enzimas tripanotona reductasa y glutatión reductasa

Tutor/es: Margot Paulino

Obtención del título: 2005

Áreas de conocimiento:

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

MAESTRÍA

Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA) (1996 - 1998)

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

Título de la disertación/tesis: Mecanismo de catálisis enzimática en flavoenzimas relacionadas con la enfermedad de Chagas: transferencia electrónica, diseño de inhibidores selectivos y cálculos de energías libres de unión

Tutor/es: Margot Paulino

Obtención del título: 1999

Áreas de conocimiento:

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

GRADO

Licenciatura en Ciencias Biológicas (1990 - 1996)

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

Título de la disertación/tesis: Estudio de las proteínas del albumen de huevo mediante el uso de técnicas IMAC

Tutor/es: Francisco Batista

Obtención del título: 1996

Áreas de conocimiento:

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

Licenciatura en Bioquímica (1990 - 1995)

Universidad de la República - Facultad de Ciencias - UDeLaR, Uruguay
Título de la disertación/tesis: Estudio de las proteínas del albumen de huevo mediante el uso de técnicas IMAC
Tutor/es: Prof. Francisco Batista
Obtención del título: 1995
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica de proteínas

TÉCNICO

Analista Programador (2001 - 2003)

Universidad ORT Uruguay - Universidad ORT Uruguay - Facultad de Ingeniería, Uruguay
Título de la disertación/tesis: Analista Programador
Tutor/es: Raúl Gonzalez
Obtención del título: 2003
Áreas de conocimiento:
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Software de despacho y GPS

Formación complementaria

CONCLUIDA

CURSOS DE CORTA DURACIÓN

Simulación Molecular usando VMD y NAMD (01/2010 - 01/2010)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay
10 horas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática y Modelado Biomolecular

SQL Server 2005 (01/2006 - 01/2006)

Sector Empresas/Privado / Empresa Privada / Infocorp, Uruguay
6 horas
Áreas de conocimiento:
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

03 Performance Suite (Datawarehousing) (01/2006 - 01/2006)

Sector Empresas/Privado / Empresa Privada / Ideasoft, Uruguay
12 horas
Áreas de conocimiento:
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

Microsoft Windows 2003 (01/2005 - 01/2005)

Sector Empresas/Privado / Empresa Privada / Infocorp, Uruguay
4 horas
Áreas de conocimiento:
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

Analista Genexus (01/2004 - 01/2004)

Sector Enseñanza Técnico-Profesional/Secundaria/Privado / Institutos privados de enseñanza técnico profesional / Institutos de idiomas / Estudios de Informática, Uruguay
60 horas
Áreas de conocimiento:
Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

Desarrollador 5 estrellas Microsoft.NET (01/2004 - 01/2004)

Sector Empresas/Privado / Empresa Privada / Microsoft Uruguay , Uruguay

80 horas

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

Introducción a la Bioinformática (01/2003 - 01/2004)

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

40 horas

Areas de conocimiento:

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

Mantenimiento de PCs (01/2003 - 01/2003)

Sector Educación Superior/Privado / Universidad ORT Uruguay / Universidad ORT Uruguay - Facultad de Ingeniería , Uruguay

60 horas

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

Host-Parasite Interactions (01/1997 - 01/1997)

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

16 horas

Areas de conocimiento:

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

Ciencia y Tecnología de la Leche (01/1996 - 01/1996)

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

56 horas

Areas de conocimiento:

Ciencias Agrícolas / Ciencias Veterinarias / Ciencias Veterinarias /

Microbiología Clínica (01/1995 - 01/1995)

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

56 horas

Areas de conocimiento:

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

Nociones básicas de Internet (01/1995 - 01/1995)

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

16 horas

Areas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

Química Cuántica (01/1995 - 01/1995)

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

56 horas

Areas de conocimiento:

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

Anatomía y Fisiología (01/1995 - 01/1995)

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

56 horas

Áreas de conocimiento:

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

Dinámica y Mecánica Molecular avanzadas y Gráficos Moleculares (01/1995 - 01/1995)

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

30 horas

Áreas de conocimiento:

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

Mecánica Cuántica aplicada a las reacciones enzimáticas (01/1995 - 01/1995)

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

6 horas

Áreas de conocimiento:

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

Operador Windows (01/1994 - 01/1994)

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

40 horas

Áreas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

Fundamentos Básicos de lenguajes C y AWK (01/1994 - 01/1994)

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

40 horas

Áreas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

Mecánica Cuántica (01/1993 - 01/1993)

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

56 horas

Áreas de conocimiento:

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

Farmacología Molecular (01/1993 - 01/1993)

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

56 horas

Áreas de conocimiento:

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

Sistemas de Computación MS-DOS y UNIX (01/1993 - 01/1993)

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

56 horas

Áreas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información / Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Análisis de Sistemas

Mecánica y Dinámica Molecular (01/1992 - 01/1992)

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

56 horas

Áreas de conocimiento:

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

PARTICIPACIÓN EN EVENTOS

Strengthening teaching and learning in STEM fields (2012)

Tipo: Seminario

Institución organizadora: LASPAU-Harvard, Estados Unidos

Áreas de conocimiento:

Ingeniería y Tecnología / Otras Ingenierías y Tecnologías / Otras Ingenierías y Tecnologías / Matemáticas

Chagaspace project annual meeting (2004)

Tipo: Encuentro

Institución organizadora: NASA, Uruguay

Áreas de conocimiento:

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

1as Jornadas Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular (2002)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: SBBM, Uruguay

Áreas de conocimiento:

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

XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2002)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: QUITEL, Uruguay

Áreas de conocimiento:

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

XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2000)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: QUITEL, Brasil

Áreas de conocimiento:

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

IX Simposio Brasileiro de Química Teórica (1997)

Tipo: Simposio

Institución organizadora: SBQT, Brasil

Áreas de conocimiento:

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

Molecular, Biochemical and Immunological approaches to parasitic diseases (1994)

Tipo: Encuentro

Institución organizadora: SAREC, Uruguay

Áreas de conocimiento:

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

II Congreso Latinoamericano de Ciencias Farmacéuticas del Cono Sur (1993)

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Sociedad Uruguaya de Química, Uruguay

Áreas de conocimiento:

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

Idiomas

Inglés

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

Francés

Entiende regular / Habla regular / Lee regular / Escribe regular

Áreas de actuación

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias de la Computación e Información /Ciencias de la Información y Bioinformática /Bioinformática y Modelado Biomolecular

INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA

Nanotecnología /Nano-materiales /Nanotecnología teórica

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

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

INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA

Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información /Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones /Análisis de Sistemas

INGENIERÍA Y TECNOLOGÍA

Otras Ingenierías y Tecnologías /Otras Ingenierías y Tecnologías /Matemáticas

Actuación profesional

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

Facultad de Química - UDeLaR / Matemática-DETEMA

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (11/2015 - a la fecha)

Profesor Agregado ,40 horas semanales / Dedicación total
Escalafón: Docente
Grado: Grado 4
Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (12/2012 - 10/2015)

Profesor Adjunto ,40 horas semanales / Dedicación total
Escalafón: Docente
Grado: Grado 3
Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (04/2009 - 11/2012)

Profesor Adjunto ,40 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 3
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (12/2005 - 03/2009)

,34 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 3
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (04/2005 - 11/2005)

,40 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 2
Cargo: Interino

Becario (09/2002 - 03/2005)

Chagaspace ,40 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 2
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (10/2001 - 08/2002)

,20 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 2
Cargo: Interino

Becario (04/1999 - 03/2002)

PEDECIBA ,40 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 2
Cargo: Interino

Becario (11/1996 - 10/1998)

PEDECIBA ,40 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (08/1995 - 10/1996)

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

Funcionario/Empleado (08/1994 - 07/1995)

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

Becario (01/1994 - 07/1994)

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

Colaborador (07/1993 - 12/1993)

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

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Diseño racional de inhibidores de enzimas relacionadas con la enfermedad de Chagas (08/1994 - a la fecha)

Esta línea de investigación busca diseñar e identificar compuestos inhibidores de enzimas relacionadas con el metabolismo oxidativo diferencial de tripanosomatídeos, mediante el uso de técnicas de Modelado Molecular y Bioinformática, con el objetivo de desarrollar fármacos eficaces contra la enfermedad de Chagas y otros males.

10 horas semanales

DETEMA, Laboratorio de Bioinformática y Farmacología molecular , Integrante del equipo

Equipo: M. PAULINO , R. CARRARO

Palabras clave: Chagas diseño de drogas tripanotona reductasa Trypanosoma cruzi

Areas de conocimiento:

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

Estudio de fulerenos y nanotubos (02/2009 - a la fecha)

Esta línea de investigación se centra en el estudio de la química del grafeno y nanotubos, mediante la concreción de modificaciones a su estructura, utilizando la funcionalización covalente. De esta forma se espera alterar propiedades importantes de estos materiales, los cuales tienen múltiples aplicaciones. A pesar de todos los avances experimentados en este sentido en las últimas décadas, la química del grafeno necesita ser expandida, empleando nuevas reacciones e intentando comprender la ocurrencia de dichas reacciones y aclarar discrepancias entre algunos resultados experimentales reportados.

10 horas semanales

DETEMA, Laboratorio de Nanotecnología Computacional , Integrante del equipo

Equipo: P. DENIS

Palabras clave: nanotubos funcionalización y dopamiento grafeno y fulerenos

Areas de conocimiento:

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

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Desarrollo de nanoestructuras derivadas del grafeno para almacenar hidrógeno (10/2012 - a la fecha)

10 horas semanales

Grupo de Nanotecnología Computacional

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: P. DENIS (Responsable)

Areas de conocimiento:

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

Maestría en Bioinformática (03/2009 - a la fecha)

5 horas semanales

Cebioinfo - DETEMA

Otra

Integrante del Equipo

En Marcha

Financiación:

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

Equipo: M. PAULINO (Responsable)

Areas de conocimiento:

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

ChagaSpace: Structure-based Drug Design and Evaluation of Trypanocidal natural compounds against Chagas Disease (04/2002 - 04/2005)

40 horas semanales

Facultad de Química , Laboratorio de Farmacología y Modelado Biomolecular

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido
Financiación:
Institución del exterior, Apoyo financiero
Equipo: M. PAULINO (Responsable) , R. CARRARO , E. ALVAREDA , A. GARCÍA

Network for Research and Training in Parasitic Diseases at the Southern cone of Latin America (12/1997 - 12/2002)

30 horas semanales
Facultad de Química , Química Cuántica
Investigación
Concluido
Financiación:
Institución del exterior, Apoyo financiero
Equipo: M. PAULINO (Responsable) , R. CARRARO , E. ALVAREDA

Diseño de medicamentos antichagásicos selectivos (10/1994 - 12/1997)

20 horas semanales
Facultad de Química , Cátedra de Química Cuántica
Investigación
Integrante del Equipo
Concluido
Equipo: M. PAULINO (Responsable) , O. TAPIA , M. HANSZ , M. VEGA , N. HIKICHI , G. TABARES , A.O.M. STOPANNI

Theoretical and Experimental Pharmacological Approach to Chagas Disease Specific Action of New Drugs Against Flavoenzyme of the Parasitic Related Organism and the Mammalian Host (10/1992 - 12/1995)

20 horas semanales
Facultad de Química , Cátedra de Química Cuántica
Investigación
Integrante del Equipo
Concluido
Financiación:
Institución del exterior, Apoyo financiero
Equipo: M. PAULINO (Responsable) , O. TAPIA , M. HANSZ , M. VEGA , N. HIKICHI , TABARES , A.O.M. STOPANNI

DOCENCIA

Química (03/2004 - a la fecha)

Grado
Responsable
Asignaturas:
Introducción a la Bioinformática, 4 horas, Teórico-Práctico
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática /

Química (08/2007 - a la fecha)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Bioinformática estructural, 4 horas, Teórico
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática y Modelado Biomolecular

Ingeniería Química (03/2005 - a la fecha)

Grado
Responsable
Asignaturas:
Álgebra Lineal (Mat03), 4 horas, Teórico-Práctico

Optimización matemática (Mat09), 4 horas, Teórico-Práctico
Ecuaciones diferenciales parciales y series de Fourier (Mat08), 4 horas, Teórico-Práctico
Nivelación, 8 horas, Teórico-Práctico
Matemática 01, 6 horas, Práctico
Matemática 02, 4 horas, Teórico-Práctico
Áreas de conocimiento:
Ingeniería y Tecnología / Otras Ingenierías y Tecnologías / Otras Ingenierías y Tecnologías /
Matemáticas
Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /
Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /
Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura /

Maestría en Bioinformática (03/2012 - a la fecha)

Maestría
Asistente
Asignaturas:
Taller de Simulaciones Biomoleculares, 6 horas, Teórico-Práctico
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Información y Bioinformática / Bioinformática y Modelado Biomolecular

Maestría en Bioinformática (09/2009 - a la fecha)

Maestría
Asistente
Asignaturas:
Bioinformática II, 6 horas, Teórico-Práctico
Taller de Simulaciones Biomoleculares, 4 horas, Teórico
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Información y Bioinformática / Bioinformática y Modelado Biomolecular
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

Química (08/2013 - 11/2013)

Grado
Responsable
Asignaturas:
Matemáticas ABC, 4 horas, Teórico-Práctico
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Matemáticas / Matemática Pura / Pre-Cálculo

Magister en Química (08/1999 - 12/2006)

Especialización
Asistente
Asignaturas:
Modelado Biomolecular, 4 horas, Teórico-Práctico

Magister en Química (08/2002 - 12/2005)

Especialización
Asistente
Asignaturas:
Estrategias en el diseño de fármacos, 4 horas, Teórico

Química Farmacéutica (06/2002 - 06/2003)

Grado
Invitado
Asignaturas:
Biología Molecular, 4 horas, Práctico

Magister en Química (03/2002 - 07/2002)

Especialización
Responsable

Asignaturas:
Modelado Molecular I, 4 horas, Teórico-Práctico

Magister en Química (03/1995 - 12/1998)

Especialización
Asistente
Asignaturas:
Modelado Molecular II, 4 horas, Práctico

GESTIÓN ACADÉMICA

Evaluación de llamados a cargos de Ayudante y Asistente en Matemáticas (06/2005 - a la fecha)

DETEMA, Grupo de Matemáticas
Participación en consejos y comisiones
Áreas de conocimiento:
Ingeniería y Tecnología / Otras Ingenierías y Tecnologías / Otras Ingenierías y Tecnologías /
Matemáticas

Miembro suplente de Comisión de Magister (06/2005 - 03/2006)

Facultad de Química
Participación en consejos y comisiones

Miembro Titular de la Comisión Directiva del DETEMA (03/2000 - 11/2005)

Facultad de Química, Departamento DETEMA
Otros

Miembro suplente Comisión Logística (03/2002 - 12/2003)

Facultad de Química
Participación en consejos y comisiones

SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PÚBLICO - PROGRAMA DE DESARROLLO DE LAS CIENCIAS BÁSICAS - URUGUAY

Área Química (PEDECIBA) / Facultad de Química

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Colaborador (01/2005 - a la fecha)

Área Química, Investigador Grado 3. , 10 horas semanales / Dedicación total

SECTOR EDUCACIÓN SUPERIOR/PRIVADO - UNIVERSIDAD ORT URUGUAY - URUGUAY

Universidad ORT Uruguay - Facultad de Ingeniería

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (09/2008 - 06/2011)

Profesor suplente, 2 horas semanales

ACTIVIDADES

DOCENCIA

Analista de Sistemas (05/2011 - 06/2011)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Sistemas de Apoyo a la Toma de Decisiones, 3 horas, Teórico

Analista de Sistemas (04/2009 - 04/2009)

Grado

Asistente

Asignaturas:

Sistemas de Apoyo a la toma de decisiones, 3 horas, Teórico

Analista Programador (09/2008 - 09/2008)

Técnico nivel superior

Asistente

Asignaturas:

Sistemas de Gestión, 4 horas, Teórico

CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: 18 horas

Carga horaria de investigación: 15 horas

Carga horaria de formación RRHH: 10 horas

Carga horaria de extensión: Sin horas

Carga horaria de gestión: 17 horas

Producción científica/tecnológica

Desde nuestra incorporación al DETEMA, hemos desarrollado actividades de investigación que, en la actualidad, tienen que ver con dos vertientes distintas:

1) Bioinformática estructural

Esta línea tiene que ver con la aplicación de metodologías de cálculo teórico para el discernimiento de la estructura y propiedades asociadas de moléculas biológicas. En nuestro caso, aplicado al estudio de la interacción molecular entre potenciales compuestos farmacológicamente activos y sitios metabólicos blanco de parásitos como el *Tripanosoma cruzi*, agente etiológico de la enfermedad de Chagas.

Se han aplicado métodos de anclaje de ligandos a enzimas, técnicas de simulación de Dinámica Molecular y análisis de relación estructura-actividad (QSAR), para obtener información sobre las características estructurales y electrónicas deseables para el diseño de un inhibidor selectivo de las enzimas parasitarias y para medir la afinidad de los mismos por los sitios de unión. A partir de estos estudios, se han propuesto algunas nuevas estructuras candidatas para la inhibición selectiva, a tiempo que se han identificado aspectos puntuales que estarían determinando la especificidad por los sitios blancos. Como ejemplo de aportes que hemos realizado en esta área, se puede citar la demostración de que la carga neta de los ligandos es un aspecto fundamental en la capacidad de unión al sitio activo enzimático parasitario y la confirmación de que se debe alcanzar un adecuado balance con el tamaño molecular de las especies. Nuestras investigaciones contribuyen a aportar información valiosa para ser utilizada en el denominado diseño racional de drogas. El punto fundamental es que la aplicación de las técnicas descritas nos confiere la capacidad de orientar el trabajo del experimentalista de forma de ahorrar tiempo y dinero en las fases de síntesis de compuestos químicos.

2) Nanotecnología computacional

La Nanotecnología computacional tiene que ver con el estudio de las propiedades químicas de nanotubos y derivados, en particular el grafeno, asistido por cálculos computacionales. El grafeno posee propiedades inusuales que atraen gran atención. Sin embargo, el hecho de poseer propiedades extraordinarias no es suficiente y se busca incesantemente la forma de modificar sus características moleculares. En este sentido, la modificación del grafeno mediante la funcionalización covalente es un método poderoso. A pesar de todos los avances verificados, la química del grafeno necesita ser considerablemente expandida empleando nuevas reacciones sin olvidar que se debe comprender por qué las reacciones ya conocidas ocurren y aclarar algunas discrepancias existentes entre los resultados experimentales reportados.

En este contexto, hemos realizado contribuciones importantes en la química del grafeno, a saber: 1) existencia de un efecto cooperativo para la adición de radicales libres que aumenta las energías de enlace a medida que los radicales libres son adicionados de a pares; 2) el azidotrimetilsilano no puede abrir un gap en la estructura electrónica del grafeno en las condiciones sugeridas por algunos estudios experimentales; 3) existencia de un efecto cooperativo para la cicloadición [2+2] de benzinas; 5) los radicales metilo y etilo pueden formar enlaces covalentes con el grafeno mientras que los radicales isopropilo y terbutilo prefieren unirse por adsorción no covalente mediante interacciones de tipo CH- π .

Producción bibliográfica

ARTÍCULOS PUBLICADOS

ARBITRADOS

New approach to accomplish the covalent functionalization of boron nitride nanosheets: Cycloaddition reactions (Completo, 2018)

F. IRIBARNE, DENIS, P.A.

Journal of Physical Chemistry, v.: 122 32, p.:18583 - 18587, 2018

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00223654

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Cycloaddition Reactions between Graphene and Fluorinated Maleimides (Completo, 2017)

P. DENIS, F. IRIBARNE

Journal of Physical Chemistry, v.: 121 24, p.:13218 - 13222, 2017

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00223654

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Adsorption of polycyclic aromatic hydrocarbons and inversion barriers of curved conjugated systems inside the molecular cage ExCage6+ (Completo, 2017)

P. DENIS, F. IRIBARNE

International Journal of Quantum Chemistry, 2017

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00207608

DOI: [10.1002/qua.25539](https://doi.org/10.1002/qua.25539)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

On the band gaps and effective masses of mono and dual doped monolayer graphene (Completo, 2017)

P. DENIS, CLAUDIA PEREYRA, F. IRIBARNE

Computational Materials Science, v.: 137 p.:20 - 29, 2017

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09270256

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Analysis of Cyclosporin A and a Set of Analogs as Inhibitors of a T. cruzi Cyclophilin by Docking and Molecular Dynamics (Completo, 2016)

R. CARRARO, F. IRIBARNE, M. PAULINO

Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 34 2, p.:399 - 413, 2016

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 07391102

DOI: [10.1080/07391102.2015.1038584](https://doi.org/10.1080/07391102.2015.1038584)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Toward the understanding of the molecular basis for the inhibition of COX-1 and COX-2 by phenolic compounds present in Uruguayan propolis and grape pomace (Completo, 2016)

M. PAULINO , E. ALVAREDA , F. IRIBARNE , P. MIRANDA , V. ESPINOSA , S. AGUILERA , H. PARDO
Journal of Biomolecular Structure and Dynamics, v.: 34 12 , p.:2643 - 2657, 2016

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 07391102

DOI: [10.1080/07391102.2015.1124808](https://doi.org/10.1080/07391102.2015.1124808)

Scopus' WEB OF SCIENCE™

Dual doped monolayer and bilayer graphene: The case of 4p and 2p elements (Completo, 2016)

P. DENIS , F. IRIBARNE

Chemical Physics Letters, v.: 658 p.:152 - 157, 2016

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

Scopus' WEB OF SCIENCE™

Bond dissociation energies and enthalpies of formation of flavonoids: A G4 and M06-2X investigation (Completo, 2016)

E. ALVAREDA , P. DENIS , F. IRIBARNE , M. PAULINO

Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1091 p.:18 - 23, 2016

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 2210271X

Scopus' WEB OF SCIENCE™

The effect of the dopant nature on the reactivity, interlayer bonding and electronic properties of dual doped bilayer graphene (Completo, 2016)

P. DENIS , F. IRIBARNE

Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 81 35 , p.:24693 - 24703, 2016

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 14639076

Scopus' WEB OF SCIENCE™

Theoretical investigation of the 9,10-bis(1,3-dithiol-2-ylidene)-9,10 dihydroanthracene (exTTF) dimer (Completo, 2015)

P. DENIS , F. IRIBARNE

Structural Chemistry, v.: 26 p.:171 - 176, 2015

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 10400400

<http://link.springer.com/article/10.1007%2Fs11224-014-0480-9#page-1>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

Hydrogen Storage in Doped Biphenylene Based Sheets (Completo, 2015)

P. DENIS , F. IRIBARNE

Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1062 p.:30 - 35, 2015

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 2210271X

Scopus' WEB OF SCIENCE™

Strong N-doped Graphene: The Case of 4-(1,3-dimethyl-2,3-dihydro-1 H-benzoimidazol-2-yl)phenyl)dimethylamine (N-DMBI) (Completo, 2015)

P. DENIS, F. IRIBARNE

Journal of Physical Chemistry C, v.: 119 27 , p.:15103 - 15111, 2015

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 19327447

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Buckycatcher polymer vs. fullerene-buckycatcher complex: which is stronger? (Completo, 2015)

P. DENIS, F. IRIBARNE

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 115 23 , p.:1668 - 1672, 2015

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00207608

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Theoretical investigation on the interaction between beryllium, magnesium and calcium with benzene, coronene, circumcoronene and graphene (Completo, 2014)

P. DENIS, F. IRIBARNE

Chemical Physics, v.: 430 p.:1 - 6, 2014

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 03010104

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Theoretical characterization of sulfur and nitrogen dual-doped graphene (Completo, 2014)

P. DENIS, C.PEREYRA, F. IRIBARNE

Computational and Theoretical Chemistry, v.: 1049 p.:13 - 19, 2014

Areas de conocimiento:

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

ISSN: 2210271X

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

A Comparative Study of Defect Reactivity in Graphene (Completo, 2013)

P. DENIS, F. IRIBARNE

Journal of Physical Chemistry C, v.: 117 p.:19048 - 19055, 2013

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 19327447

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

C2V or C6V: Which is the Most Stable Structure of the Benzene-Lithium Complex? (Completo, 2013)

P. DENIS, F. IRIBARNE

Chemical Physics Letters, v.: 573 p.:15 - 18, 2013

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00092614

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Cooperative behavior in functionalized graphene: explaining the occurrence of 1,3 cycloaddition of azomethine ylides onto graphene (Completo, 2012)

P. DENIS, F. IRIBARNE
Chemical Physics Letters, v.: 550 p.:111 - 117, 2012
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Nanotecnología
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00092614
Scopus WEB OF SCIENCE™

A First Principles Study on the Interaction between Alkyl Radicals and Graphene (Completo, 2012)

P. DENIS, F. IRIBARNE
Chemistry-A European Journal, v.: 18 24, p.:7568 - 7574, 2012
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Nanotecnología
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 09476539
Scopus WEB OF SCIENCE™

[2+2] Cycloadditions onto Graphene (Completo, 2012)

P. DENIS, F. IRIBARNE
Journal of Materials Chemistry, v.: 22 12, p.:5470 - 5477, 2012
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Nanotecnología
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 09599428
Scopus WEB OF SCIENCE™

How is the stacking interaction of bilayer graphene affected by the presence of defects? (Completo, 2012)

P. DENIS, R. FACCIO, F. IRIBARNE
Computational and Theoretical Chemistry, v.: 995 p.:1 - 7, 2012
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Nanotecnología
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 2210271X
<http://dx.doi.org/10.1016/j.comptc.2012.06.014>
Scopus WEB OF SCIENCE™

Monolayer and Bilayer Graphene Functionalized with Nitrene Radicals (Completo, 2011)

P. DENIS, F. IRIBARNE
Journal of Physical Chemistry, v.: 115 p.:195 - 203, 2011
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Nanotecnología
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00223654

Addition of sulfur radicals to fullerenes (Completo, 2011)

P. DENIS, F. IRIBARNE
International Journal of Quantum Chemistry, v.: 111 15, p.:4266 - 4275, 2011
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Nanotecnología
Medio de divulgación: Papel
ISSN: 00207608
Scopus WEB OF SCIENCE™

Theoretical Investigation of Carbon Sulfur Triple bonds (Completo, 2011)

P. DENIS, F. IRIBARNE
Chemistry-A European Journal, v.: 17 6, p.:1979 - 1987, 2011

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 09476539

DOI: [chem.201002840](https://doi.org/10.1002/chem.201002840)

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chem.201002840/abstract>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

On the applicability of cluster models to study the chemical reactivity of carbon nanotubes (Completo, 2011)

P. DENIS, F. IRIBARNE

Journal of Computational Chemistry, v.: 32 11, p.:2397 - 2403, 2011

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01928651

Scopus® WEB OF SCIENCE™

The 1,3 dipolar cycloaddition of azomethine ylides o graphene, single wall carbon nanotubes and C60 (Completo, 2010)

P. DENIS, F. IRIBARNE

International Journal of Quantum Chemistry, v.: 110 p.:1764 - 1771, 2010

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: En prensa

ISSN: 00207608

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Thiophene Adsorption on Single Wall Carbon Nanotubes and Graphene (Completo, 2010)

P. DENIS, F. IRIBARNE

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 957 p.:114 - 119, 2010

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Phenolic contents and antioxidant activities of Central-southern Uruguayan propolis extracts (Completo, 2010)

M. PAULINO, S. DE PAULA, I. ELINGOLD, E. ALVAREDA, M. CASANOVA, F. IRIBARNE, S. AGUILERA MORALES, M. DUBIN

Journal of the Chilean Chemical Society, v.: 55 1, p.:141 - 146, 2010

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 07179707

WEB OF SCIENCE™  Scopus®

Hydrogenated double wall carbon nanotubes (Completo, 2009)

P. DENIS, F. IRIBARNE, R. FACCIO

Journal of Chemical Physics, v.: 130 19, p.:194704 - 194710, 2009

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00219606

Scopus® WEB OF SCIENCE™

On the hydrogen addition to graphene (Completo, 2009)

P. DENIS, F. IRIBARNE

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 907 1-3, p.:93 - 103, 2009

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

Scopus' WEB OF SCIENCE™

Assaying phenothiazine derivatives as trypanothione reductase and glutathione reductase inhibitors by molecular docking and Molecular Dynamics (Completo, 2009)

F. IRIBARNE, M. PAULINO, S. AGUILERA MORALES, O. TAPIA

Journal of molecular graphics & modelling, v.: 28 p.:371 - 381, 2009

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10933263

Scopus' WEB OF SCIENCE™

Interaction energies of nitrofurans with trypanothione reductase and glutathione reductase studied by molecular docking (Completo, 2007)

F. IRIBARNE, M. PAULINO, S. AGUILERA MORALES, H. CERECETTO, M. GONZALEZ, O. TAPIA

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 818 1-3, p.:7 - 22, 2007

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

Scopus' WEB OF SCIENCE™

The chemotherapy of Chagas disease: An overview (Completo, 2005)

M. PAULINO, F. IRIBARNE, M. DUBIN, O. TAPIA, S. AGUILERA MORALES, A.O.M. STOPANNI

Mini Reviews in Medicinal Chemistry, v.: 5 p.:499 - 519, 2005

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 13895575

Scopus' WEB OF SCIENCE™

Computer assisted design of potentially active anti-trypanosomal compounds (Completo, 2002)

M. PAULINO, F. IRIBARNE, M. HANSZ, M. VEGA, G. SEOANE, H. CERECETTO, R. DI MAIO, I. CARACELLI, J. ZUCKERMAN-SCHPECTOR, C. OLEA, A.O.M. STOPANNI, M. BASOMBRÍO, M. BERRIMAN, A.H. FAIRLAMB, O. TAPIA

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 584 p.:95 - 105, 2002

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 01661280

Scopus' WEB OF SCIENCE™

Docking and molecular dynamics studies at trypanothione reductase and glutathione reductase binding sites (Completo, 2002)

F. IRIBARNE, M. PAULINO, S. AGUILERA MORALES, M. MURPHY, O. TAPIA

Journal of Molecular Modeling, v.: 5 p.:173 - 183, 2002

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 09485023

Scopus'

Hydride transfer transition structure as a possible unifying redox step for describing the branched mechanism of glutathione reductase. Molecular electronic antecedents (Completo, 2000)

F. IRIBARNE , M. PAULINO , O. TAPIA

Theoretical Chemistry accounts (Print), v.: 103 6 , p.:451 - 462, 2000

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 1432881X

Scopus® WEB OF SCIENCE™

PUBLICACIÓN DE TRABAJOS PRESENTADOS EN EVENTOS

Anti-inflammatory Activity of Phenolic Compounds extracted from Uruguayan Propolis and Grape (Vitis Vinifera) Pomace: In Vitro and In Silico Assays (2015)

Resumen

E. ALVAREDA , P. MIRANDA , F. IRIBARNE , H. PARDO , M. PAULINO

Evento: Nacional

Descripción: Cuarto Encuentro Nacional de Química (ENAQUI4)

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

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

Resumen

F. IRIBARNE

Evento: Internacional

Descripción: 10th WATOC Congress

Ciudad: Santiago de Chile

Año del evento: 2014

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Consenso farmacofórico, QSAR y filtrado virtual para la obtención de nuevos agonistas de receptores nicotínicos de acetilcolina (2011)

Resumen

F. IRIBARNE

Evento: Internacional

Descripción: Segundo Encuentro de Ciencias Químicas del Uruguay (ENAQUI)

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2011

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

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

Resumen

F. IRIBARNE

Evento: Nacional

Descripción: XIII Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2010

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Estudio de la capacidad de unión a ciclooxigenasa II y biodistribución de fenoles contenidos en productos naturales (2010)

Resumen
F. IRIBARNE

Evento: Nacional
Descripción: XIII Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2010
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Measuring binding affinities of phenothiazines to trypanothione reductase and glutathione reductase by theoretical docking and Molecular Dynamics (2005)

Resumen
F. IRIBARNE

Evento: Internacional
Descripción: Annual International Meeting on Membranes and membrane proteins
Ciudad: Dublin
Año del evento: 2005
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Estudios de anclaje de compuestos orgánicos adaptables a los sitios de Tripanotona y Glutatión reductasa (2002)

Resumen
F. IRIBARNE

Evento: Nacional
Descripción: X Jornadas Uruguayas de la Sociedad de Biociencias
Ciudad: Maldonado
Año del evento: 2002
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Estudios de Farmacología Molecular de compuestos bioactivos en tripanosomatídeos (2002)

Resumen
F. IRIBARNE

Evento: Nacional
Descripción: X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias
Ciudad: Maldonado
Año del evento: 2002
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Molecular pharmacology studies on anti-trypanosomal active compounds (2002)

Resumen
F. IRIBARNE

Evento: Internacional
Descripción: XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2002

Áreas de conocimiento:

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

Estudios de docking de compuestos nitrofuránicos en tripanotona y glutatión reductasas: un análisis gráfico (2002)

Resumen

F. IRIBARNE

Evento: Internacional

Descripción: XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2002

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Estudio de docking de compuestos fenotiazínicos en tripanotona y glutatión reductasas: un análisis gráfico (2002)

Resumen

F. IRIBARNE

Evento: Nacional

Descripción: 1 Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2002

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Estudio de docking de derivados fenotiazínicos en los sitios activos de tripanotona reductasa y glutatión reductasa (2001)

Resumen

F. IRIBARNE

Evento: Internacional

Descripción: XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)

Ciudad: Toulouse

Año del evento: 2001

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Estudios de docking y Dinámica Molecular en los sitios de unión de tripanosoma reductasa y glutatión reductasa (2000)

Resumen

F. IRIBARNE

Evento: Internacional

Descripción: XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)

Ciudad: Caxambú

Año del evento: 2000

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Diseño asistido por computadoras de compuestos tripanosomatídeos potencialmente activos (2000)

Resumen

F. IRIBARNE

Evento: Internacional

Descripción: XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)
Ciudad: Caxambú
Año del evento: 2000
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Proton relays at the N-site and G-site of glutathione reductase (1998)

Resumen
F. IRIBARNE

Evento: Internacional
Descripción: II Congress Quantum systems in Chemistry and Physics
Ciudad: Granada
Año del evento: 1998
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Structural aspects of specificity in trypanothione and glutathione reductases binding sites and the design of new compounds with potential anti-trypanosomal activity (1997)

Resumen
F. IRIBARNE

Evento: Internacional
Descripción: VI Congress on Antiparasitic Chemotherapy
Ciudad: Leuven
Año del evento: 1997
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Possible roles of proton relays in the action mechanism of glutathione reductase (1997)

Resumen
F. IRIBARNE

Evento: Internacional
Descripción: IX Simposio Brasileiro de Química Teórica (SBQT)
Ciudad: Caxambú
Año del evento: 1997
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Structural aspects of specificity in trypanothione and glutathione reductases binding sites and the design of new compounds with potential anti-trypanosomal activity (1997)

Completo
M. PAULINO , F. IRIBARNE , N. HIKICHI , M. HANSZ , M. VEGA , O. TAPIA

Evento: Internacional
Descripción: Technical Report
Ciudad: Uppsala
Año del evento: 1997
Publicación arbitrada
Editorial: Uppsala University
Ciudad: Uppsala
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la
Información y Bioinformática / Bioinformática y Modelado Biomolecular
Medio de divulgación: Papel

Comparison of glutathione reductase and trypanothione reductase binding sites (1995)

Resumen
F. IRIBARNE

Evento: Internacional
Descripción: XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL)
Ciudad: Pucón
Año del evento: 1995
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Tripanotona reductasa de Crithidia fasciculata: extracción y determinación de actividad (1993)

Resumen
F. IRIBARNE

Evento: Internacional
Descripción: II Congreso Latinoamericano de Ciencias Farmacéuticas del Cono Sur
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 1993
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Substrate specificity of trypanothione reductase (1993)

Resumen
F. IRIBARNE

Evento: Internacional
Descripción: II Congreso Latinoamericano de Ciencias Farmacéuticas del Cono Sur
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 1993
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel

Study of the substrate specificity of Trypanothione reductase (1993)

Resumen
F. IRIBARNE

Evento: Internacional
Descripción: VII Simposio Brasileiro de Química Teórica
Ciudad: Caxambú
Año del evento: 1993
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformática
Medio de divulgación: Papel

Evaluaciones

EVALUACIÓN DE PROYECTOS

EVALUACIÓN INDEPENDIENTE DE PROYECTOS

Proyectos de Iniciación a la Investigación (2015)

Uruguay
CSIC
Cantidad: Menos de 5

EVALUACIÓN DE PUBLICACIONES

COMITÉ EDITORIAL

Journal of Molecular Modelling (2010 / 2011)

Cantidad: Menos de 5

European Journal of Medicinal Chemistry (2010 / 2011)

Cantidad: Menos de 5

REVISIONES

Canadian Journal of Chemistry (2015)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Indian Journal of Microbiology (2014)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Journal of Physical Chemistry (2012 / 2016)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Journal of Physical Chemistry Letters (2010 / 2015)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: De 5 a 20

EVALUACIÓN DE CONVOCATORIAS CONCURSABLES

Llamados a becas de Magister y Doctorado en Química (2001 / 2005)

Uruguay

Cantidad: De 5 a 20

PEDECIBA-Química

JURADO DE TESIS

Doctorado en Química, Magister en Bioinformática, Licenciatura en Química (2010 / 2016)

Jurado de mesa de evaluación de tesis

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

Uruguay

Nivel de formación: Doctorado

Formación de RRHH

TUTORÍAS CONCLUIDAS

POSGRADO

Modelado y estudio de complejos de Ciclosporina A y compuestos relacionados con una ciclofilina de Trypanosoma cruzi (2013)

Tesis de doctorado

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

Uruguay

Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

Nombre del orientado: Roberto Carraro

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Áreas de conocimiento:

Otros datos relevantes

PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS

How is the stacking interaction of bilayer graphene affected by the presence of deffects? (2012)

(Internacional)
Computational and Theoretical Chemistry
Artículo entre los 5 más descargados del año de la revista, habiéndose publicado en el último trimestre del año

Investigador Nivel I (2011)

(Nacional)
Agencia Nacional de Investigación e Innovación

Selección de biografía para el Who's Who en Ciencia e Ingeniería (2010)

(Internacional)
Marquis Who's who
Inclusión de biografía personal y profesional para la edición 2011-2012 del libro Who's Who in Science and Engineering.

On the hydrogen addition to graphene (2010)

(Internacional)
Journal of Molecular Structure (TEOCHEM)
Artículo entre los 3 más descargados del año de la revista TEOCHEM

Candidato a Investigador (2009)

Agencia Nacional de Investigación e Innovación

Hydrogenated Double Wall Carbon Nanotubes (2009)

(Internacional)
American Chemical Society and American Institute of Physics
Artículo seleccionado para destacarse en Virtual Journal of Nanoscale Science & Technology,

Investigador Grado 3 (2005)

(Nacional)
PEDECIBA-Química

Beca de Doctorado en Química (1999)

(Nacional)
PEDECIBA-Química

Beca de Maestría en Química (1996)

(Nacional)
PEDECIBA-Química

PRESENTACIONES EN EVENTOS

10th WATOC Congress (2014)

Congreso
Assaying Cyclosporin A and a set of analogues as inhibitors of a T. cruzi cyclophilin by docking and

Molecular Dynamics

Chile

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 10

Areas de conocimiento:

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

Segundo Encuentro de Ciencias Químicas del Uruguay (ENAQUI) (2011)

Encuentro

Consenso farmacofórico, QSAR y filtrado virtual para la obtención de nuevos agonistas de receptores nicotínicos de acetilcolina

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: PEDECIBA

Areas de conocimiento:

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

ISCB Latin America (2010)

Congreso

In silico studies of sesquiterpene lactones with inhibitory activity of nuclear factor kappa B

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Areas de conocimiento:

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

XIII Congreso de la Sociedad Uruguaya de Biociencias (2010)

Congreso

Estudios de la capacidad de unión a ciclooxigenasa II y biodistribución de fenoles contenidos en productos naturales

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: SUB

Areas de conocimiento:

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

Annual International Meeting - Membranes and membrane proteins (2005)

Congreso

Measuring binding affinities of phenothiazines to trypanothione reductase and glutathione reductase by theoretical docking and Molecular Dynamics

Irlanda

Tipo de participación: Poster

Areas de conocimiento:

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

Tercer Chagaspace Project Annual Meeting (2004)

Encuentro

Binding affinities of phenothiazines to trypanothione and glutathione reductase binding sites

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 20

Nombre de la institución promotora: NASA

Areas de conocimiento:

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

X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias (2002)

Congreso

Estudios de Farmacología Molecular de Compuestos Bioactivos en Tripanosomatídeos

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: SUB

Areas de conocimiento:

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

X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias (2002)

Congreso

Estudios de anclaje de compuestos orgánicos adaptables a los sitios de la Tripanotona y Glutación Reductasa

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: SUB

Areas de conocimiento:

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

XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) (2002)

Congreso

Molecular pharmacology studies on anti-trypanosomal active compounds

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Areas de conocimiento:

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

XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) (2002)

Congreso

Docking studies of nitrofurán compounds in trypanothione and glutathione reductases active sites: A graphical análisis

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Areas de conocimiento:

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

1as Jornadas Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular (2002)

Congreso

Estudios de docking de compuestos fenotiazínicos en tripanotona y glutación reductasa: Un análisis gráfico

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: SBBM

Areas de conocimiento:

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

XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) (2001)

Congreso

Estudio de docking de derivados fenotiazínicos en los sitios activos de tripanotona reductasa y glutación reductasa

Francia

Tipo de participación: Poster

Areas de conocimiento:

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

XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) (2000)

Congreso

Estudios de docking y dinámica molecular en los sitios de unión de tripanotona reductasa y glutación reductasas

Brasil

Tipo de participación: Poster

Areas de conocimiento:

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

XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) (2000)

Congreso

Diseño asistido por computadoras de compuestos tripanosomatídeos potencialmente activos
Brasil

Tipo de participación: Poster

Areas de conocimiento:

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

II Congreso Quantum systems in Chemistry and Physics (1998)

Congreso

Proton relays at the N-site and G-site of glutathione reductase

España

Tipo de participación: Poster

Areas de conocimiento:

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

VI Congreso on Antiparasitic chemotherapy, COST/ACRIVAL/IOCD (1997)

Congreso

Structural aspects of specificity in trypanothione and glutathione reductases binding sites and the design of new compounds with potential anti-trypanosomal activity

Bélgica

Tipo de participación: Poster

Areas de conocimiento:

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

IX Simpósio Brasileiro de Química Teórica (SBQT) (1997)

Congreso

Possible roles of proton relays in the action mechanism of glutathione reductase

Brasil

Tipo de participación: Otros

Areas de conocimiento:

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

XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (1995)

Congreso

Comparison of glutathione reductase and trypanothione reductase binding sites

Brasil

Tipo de participación: Poster

Areas de conocimiento:

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

II Congreso Latinoamericano de Ciencias Farmacéuticas del Cono Sur (1993)

Congreso

Substrate specificity of trypanothione reductase

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Farmacia

Areas de conocimiento:

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

II Congreso Latinoamericano de Ciencias Farmacéuticas del Cono Sur (1993)

Congreso
Tripanotona reductasa de Crithida fasciculata: extracción y determinación de actividad
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Farmacia
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioinformática y Modelado Biomolecular

VII Simposio Brasileiro de Química Teórica (1993)

Simposio
Study of substrate specificity of Trypanothione reductase
Brasil
Tipo de participación: Poster
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica/Bioinformática

JURADO/INTEGRANTE DE COMISIONES EVALUADORAS DE TRABAJOS ACADÉMICOS

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 (2016)

Candidato: Elena Alvareda
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado
F. IRIBARNE
Doctorado en Química (orientación Educación en Química) / Sector Educación Superior/Público /
Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español

Identificación de los blancos de acción molecular de flavonoides mediante tamizaje virtual en librerías de estructura tridimensional de proteínas (2016)

Candidato: Diego Carvalho
Tipo Jurado: Tesis de Maestría
F. IRIBARNE
Maestría en Bioinformática (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público /
Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español

Desarrollo de moléculas bioactivas mediante metodologías de química verde (2015)

Candidato: Mariana Ingold
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado
F. IRIBARNE
Doctorado en Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República /
Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español

Nuevos materiales como sistemas para absorción de energía en el infrarrojo (2015)

Candidato: Benjamín Montenegro
Tipo Jurado: Tesis/Monografía de grado
F. IRIBARNE
Licenciatura en Bioquímica y Licenciatura en Biología / Sector Educación Superior/Público /
Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español

Diseño y preparación de nanomateriales carbonosos para spintrónica (2014)

Candidato: Sebastián Píriz
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado
F. IRIBARNE
Doctorado en Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República /
Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay

País: Uruguay
Idioma: Español

Aceleración de cálculos de Dinámica Molecular mediante el uso de GPUs (2014)

Candidato: Yamandú González
Tipo Jurado: Tesis de Maestría
F. IRIBARNE
Maestría en Bioinformática (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español

Caracterización in vivo, in vitro e in silico de una serie de agonistas nicotínicos derivados de citosina (2010)

Candidato: Andrés Abin
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado
F. IRIBARNE
Doctorado en Química / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español

Información adicional

Becas de Estudio
-Beca de Doctorado PEDECIBA-Química (1999-2002).
-Beca de investigación de la Universidad Católica del Norte, Antofagasta-Chile (junio 2000).
-Beca de Magister PEDECIBA-Química (1996-1998).
-Beca de investigación de la Universidad Jaume I, Castellón-España (mayo-junio 1997).
Pasantías y visitas de investigación
-Pasantías de investigación realizadas en el Laboratorio de Bioquímica (Facultad de Química) en los períodos mayo-agosto 1993 y octubre 1994-mayo 1995.
-Pasantía de investigación realizada en el Departamento de Ciencias Experimentales de la Universitat Jaume I, Castelló-España (mayo-junio 1997), financiada por PEDECIBA-Química.
-Pasantía de investigación realizada en el Laboratorio de Cristalografía, Estereodinámica e Modelagem Molecular de la Universidad Federal de Sao Carlos, Sao Paulo-Brasil (julio 1999), financiada por Mercosur.
-Pasantía de investigación realizada en el Laboratorio de Cristalografía Macromolecular, Depto. de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Católica del Norte, Antofagasta-Chile (junio-julio 2000), financiada por PEDECIBA-Química y la Universidad Católica del Norte.
-Visita de investigación al Instituto Manuel Fatała Chabén, Bs. As., Argentina (12-15 noviembre 2002).
Proyectos de investigación concursados
-"**Investigación y desarrollo de fitoterapéuticos nanoencapsulados con múltiples acciones farmacológicas asociadas a las especies reactivas de oxígeno**". Responsable. Convocatoria Fondos Clemente Estable 2017. En evaluación.
-"**Tamizaje reverso aplicado al descubrimiento de nuevos blancos farmacológicos de p-naftoquinonas para el desarrollo de medicamentos contra el mal de Chagas**". Co-responsable. Convocatoria CSIC I+D 2014. No financiado.
-"**Cálculos de energías libres de unión a las enzimas glutatión reductasa y tripanotona reductasa**", CSIC, 1999, seleccionado pero no financiado por falta de fondos. Responsable.
-"**Knowledge assisted design and testing of antitrypanosomatid compounds targeted towards the active site of flavoenzymes**", TWAS, Research Grant, 2002, seleccionado pero no financiado por falta de fondos. Responsable.
-"**Determinación de motivos estructurales proteicos mediante métodos de Bioinformática**", PDT, 2006, no seleccionado. Responsable.
-"**Diseño de nanoestructuras híbridas para almacenamiento reversible de hidrógeno**", Fondo Sectorial de Energía, 2009, no seleccionado. Integrante del equipo.
-"**Estudio teórico de la adición de radicales centrados en azufre u oxígeno a fullerenos, nanotubos y láminas de grafeno**", Fondo Clemente Estable (ANII), 2010, no seleccionado. Integrante del equipo.
Proyectos de docencia concursados
-"**Curso Diferencial Análisis I**". Responsable. Comisión Sectorial de Enseñanza. Presentado en los llamados de "Apoyo académico-disciplinar a cursos de primer año de las carreras universitarias" de 2016 y 2017. Financiado en 2016.
Formación de investigadores
-Colaboración en el entrenamiento y formación en técnicas de Modelado Biomolecular de la Ph. D Patricia Esperón (Facultad de Química - Universidad de la República), 1998-2000.
-Colaboración en el entrenamiento en técnicas de Modelado Biomolecular de los Ph. D. Sara

Aguilera y Miguel Murphy (Universidad Católica del Norte, Antofagasta – Chile), julio 1999.

- Colaboración en el entrenamiento en técnicas de Modelado Biomolecular de la Est. Ana García, 2001-2003 y la Bach. Elena Alvareda, a partir de 2002.
- Colaboración en el entrenamiento en técnicas de Modelado Biomolecular de la Est. Loreto Calderón (Universidad Católica del Norte, Antofagasta, Chile), febrero 2003 y 2004.
- Colaboración en el entrenamiento en técnicas de Modelado Biomolecular de la Est. Patricia Garavaglia (Instituto Fatala-Chabén, Bs. As., Argentina), octubre-noviembre 2003.
- Colaboración en el entrenamiento en técnicas de Modelado Biomolecular de la B. Sc. Catalina Guida, del Insituto INGEBI (Bs. As., Argentina), febrero 2004.
- Colaboración en el entrenamiento en técnicas de Bioinformática y Modelado Biomolecular del Q.F. Roberto Carraro, estudiante de Doctorado (Facultad de Química - Universidad de la República), 2004-2006.

Organización de cursos o congresos

- Miembro del Comité Organizador del 1er Encuentro Nacional de Químicos del Uruguay (ENAQUI) organizado por PEDECIBA-Química (3-4 diciembre 2009, Montevideo, Uruguay).
- Integrante del Comité Organizador de la *Jornada de Difusión de la investigación del DEQUIFIM vinculada al medio* (Montevideo, setiembre 2005).
- Participación en la organización del Tercer Meeting Annual del proyecto ChagaSpace (7-10 setiembre 2004, Montevideo y Punta del Este, Uruguay).
- Participación en la organización del XXVII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL) (1-6 setiembre 2002, Montevideo-Uruguay).

Generación de infraestructura

- Instalación y configuración, junto al Dr. Pablo Denis, de uno de los clusters de computadores más grandes del país (272 procesadores y 2.176 TB de RAM), dedicado al cálculo de estructuras y propiedades en sistemas químicos complejos (Nanotecnología y Química Computacional) (20120142).

Gestión universitaria

- Miembro titular de la Comisión de Reválidas de la Facultad de Química (2016-2017)
- Integrante del grupo de trabajo sobre la Enseñanza y Rendimiento Estudiantil en Matemáticas, como representante, junto al Ing. Mauricio González, de Facultad de Química (desde julio 2012).
- Integración de Comisiones Asesoras de Méritos en llamados a cargos del DETEMA (Matemáticas, Estadística, Informática, Química Computacional, Bioinformática) (2002 hasta el presente). Más de 40 Comisiones integradas.
- Integrante de la Comisión Organizadora de la re-evaluación de Investigadores de PEDECIBA-Química (2009).
- Miembro Suplente de la Comisión de Magister de Facultad de Química (2005-2006).
- Miembro Titular de la Comisión Directiva del DETEMA en representación de Docentes Grados 1 y 2 (marzo 2003-noviembre 2005).
- Integración de Comisiones evaluadoras de becas de Maestría y Doctorado financiadas por PEDECIBA-Química, en representación de los Estudiantes de posgrado (2002-2004).
- Miembro Titular de la Comisión Directiva del DETEMA en representación de Estudiantes de Posgrado (marzo 2000-febrero 2003).
- Miembro Suplente de la Comisión de Logística de la Facultad de Química (2002).

Extensión universitaria

- Cursos de extensión Dictado del módulo “Herramientas de Modelado Biomolecular” en las Jornadas de actualización y profundización para docentes de Centros Regionales de Profesores (CERP) (MEMFOD, CODICEN, febrero 2004).

Indicadores de producción

PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA	58
Artículos publicados en revistas científicas	36
Completo	36
Trabajos en eventos	22
EVALUACIONES	9
Evaluación de proyectos	1
Evaluación de publicaciones	6
Evaluación de convocatorias concursables	1
Jurado de tesis	1
FORMACIÓN RRHH	1
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas	1
Tesis de doctorado	1

