



VANESSA ARIADNA LEONE  
ALVAREZ

Dr.

[vanessa.leonealvarez@nih.gov](mailto:vanessa.leonealvarez@nih.gov)

+1-3015943181

SNI

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas

Categorización actual: Nivel I (Asociado)

Fecha de publicación: 18/04/2019  
Última actualización: 26/01/2015

## Datos Generales

### INSTITUCIÓN PRINCIPAL

National Heart, Lung and Blood Institute, National Institutes of Health / Estados Unidos

### DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: National Heart, Lung and Blood Institute, National Institutes of Health / Sector Extranjero/Internacional/Otros

Dirección: 5635 Fishers Lane / 20852 / Rockville , Estados Unidos

Teléfono: (1) 3015943181

Correo electrónico/Sitio Web: [vanessa.leonealvarez@nih.gov](mailto:vanessa.leonealvarez@nih.gov)

## Formación

### Formación académica

#### CONCLUIDA

#### DOCTORADO

##### (2005 - 2009)

Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati In Trieste , Italia

Título de la disertación/tesis/defensa: Computational approaches to protein-protein association events relevant to molecular medicine

Tutor/es: Paolo Carloni

Obtención del título: 2009

Financiación:

Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Trieste , Italia

Palabras Clave: calculos de free energy metadinamica modelos de homologia peptidil-prolil-cis/trans isomerasas receptor del dolor P2X3docking proteina-proteina

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Bioinformatica, modelado molecular y simulaciones aplicados a sistemas biologicos

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

#### GRADO

##### Licenciatura en Bioquímica (2000 - 2005)

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

Título de la disertación/tesis/defensa: Análisis Comparativo del mecanismo de reacción del glioxal con metilamina y aminoguanidina y el papel del solvente en ellos: una primer aproximación a las etapas iniciales de la glicación y su inhibición

Tutor/es: Elena Laura Coitiño Izaguirre

Obtención del título: 2005

Palabras Clave: calculos de quimica cuantica reactividad quimica reacciones de glicacion

Areas de conocimiento:

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

### Formación complementaria

#### CONCLUIDA

## POSDOCTORADOS

### **Mechanisms of energy conversion in membrane transporters and enzymes. Group leader: Dr José Faraldo-Gómez (2009 - 2013)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Max Planck Institute of Biophysics , Alemania  
Palabras Clave: modelos de homología ATP sintasa plegamiento ab-initio de proteínas de membrana cálculos de energía libre análisis de secuencia especificidad iónica de las ATP-sintasas  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Análisis de secuencia, modelos de homología y ab-initio (Rosetta)  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Dinámica molecular, cálculos de free energy aplicados a sistemas biológicos

## EN MARCHA

## POSDOCTORADOS

### **Mechanisms of energy conversion in membrane transporters and enzymes. Group leader: Dr José Faraldo-Gómez (2013)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / National Heart, Lung and Blood Institute, National Institutes of Health , Estados Unidos

## Idiomas

### **Español**

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

### **Inglés**

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

### **Italiano**

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

### **Alemán**

Entiende regular / Habla regular / Lee regular / Escribe regular

### **Francés**

Entiende regular / Habla regular / Lee regular / Escribe regular

## Áreas de actuación

### **CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS**

Ciencias Biológicas/Biofísica /Modelado de proteínas y simulaciones aplicados a sistemas biológicos

### **CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS**

Ciencias de la Computación e Información /Ciencias de la Información y Bioinformática /Análisis de secuencia primaria, modelado de proteínas por homología o ab-initio

## Actuación profesional

### **SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ESTADOS UNIDOS**

National Heart, Lung and Blood Institute, National Institutes of Health

## VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

### **Otro (09/2013 - a la fecha)**

Visiting Fellow - Postdoc ,40 horas semanales / Dedicación total

## SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ALEMANIA

Max Planck Institute of Biophysics

### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

**Otro (11/2009 - 08/2013)** Trabajo relevante

Postdoc ,40 horas semanales / Dedicación total

### ACTIVIDADES

#### DOCENCIA

**IMPreS program (10/2010 - 10/2010)**

Doctorado

Asistente

Asignaturas:

modeling & simulation (curso intensivo de 1 semana), 36 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / simulaciones, modelling y docking  
proteina-proteina de proteínas de membrana

## SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/ENSEÑANZA SUPERIOR - ALEMANIA

Universitat Frankfurt (Johann-Wolfgang-Goethe)

### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

**Colaborador (08/2010 - 09/2010)**

Docente curso intensivo ,15 horas semanales

### ACTIVIDADES

#### DOCENCIA

**Escuela estiva "Current Techniques in Membrane Proteomics" (08/2010 - 09/2010)**

Doctorado

Asistente

Asignaturas:

Modulo C1: Molecular Modeling of Membrane Proteins, 15 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Simulacion de proteínas de membrana

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Analisis de secuencia, modelos de homologia de proteínas de membrana

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

Facultad de Ciencias - UDeLaR

### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

**Funcionario/Empleado (11/2005 - 03/2009)** Trabajo relevante

,20 horas semanales

Licencia sin goce de sueldo durante toda la duracion del cargo a efectos de realizar estudios de Doctorado en la Internacional School of Advanced Studies (ISAS - SISSA) en Trieste, Italia.

Escalafón: Docente

Grado: Grado 1

Cargo: Efectivo

**Funcionario/Empleado (08/2003 - 11/2005)** Trabajo relevante

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

**Funcionario/Empleado (08/2002 - 11/2002)**

,20 horas semanales  
Colaboracion en el proyecto CSIC de la Dra. E.L. Coitino "Estudio del mecanismo de accion del Cisplatin y proposicion de neuvos analogos como agentes quimioterapeuticos"  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

**ACTIVIDADES****DOCENCIA****Licenciatura en Bioquímica (08/2002 - 11/2005 )**

Grado  
Asistente  
Asignaturas:  
Fisicoquímica II - módulo Estructura y Propiedades Moleculares (EPM), 4 horas, Teórico-Práctico

**PEDECIBA (08/2003 - 11/2005 )**

Doctorado  
Asistente  
Asignaturas:  
Curso-Taller de Química Computacional modulo II - modelado de la cinetica de reacciones quimicas utilizando VTST, 9 horas, Teórico-Práctico  
Curso-Taller de Química Computacional modulo I - Aplicacion de metodos de quimica cuantica a procesos quimicos, 8 horas, Teórico-Práctico

**Educacion Permanente - UDELAR (06/2002 - 06/2005 )**

Especialización  
Asistente  
Asignaturas:  
Diseño y visualización asistida por PC de la estructura 3D de moléculas y macromoléculas - curso intensivo (total 32hs), 32 horas, Práctico

**GESTIÓN ACADÉMICA****Delegada titular del Orden Estudiantil (12/2003 - 06/2004 )**

Comisión del Instituto de Química Biológica  
Participación en cogobierno

**Delegada suplente del Orden Estudiantil (06/2002 - 12/2003 )**

Comisión Coordinadora Docente de la Licenciatura en Bioquímica  
Participación en cogobierno

**CARGA HORARIA**

Carga horaria de docencia: 5 horas  
Carga horaria de investigación: 35 horas  
Carga horaria de formación RRHH: Sin horas  
Carga horaria de extensión: Sin horas  
Carga horaria de gestión: Sin horas

**Producción científica/tecnológica**

Mi trabajo de investigación está centrado en el estudio de procesos biológicos a nivel molecular. Con este fin utilizo una gran variedad de enfoques teóricos, que incluyen simulaciones clásicas y cuánticas, modelado estructural o herramientas bioinformáticas. En todos estos casos, mi trabajo

es llevado a cabo en estrecha colaboración con grupos experimentales o haciendo referencia a resultados experimentales presentes en la literatura. Ultimamente he realizado experimentos para apoyar o confirmar hipótesis generadas a partir de mis simulaciones.

Durante mi tesis de doctorado me centré en el estudio de dos procesos patológicos; la infección del virus HIV y la señalización del dolor. En la primer área, estudiamos la isomerización cis/trans de proteínas de la cápside del HIV-1 por la ciclofilina. Utilizando métodos de energía libre derivamos una nueva hipótesis del mecanismo completo de isomerización catalizado por esta enzima, en concordancia con los datos experimentales disponibles en la literatura.

En la segunda área, en colaboración con el grupo del Prof. Andrea Nistri, estudiamos el mecanismo molecular por el cual la quinasa Csk fosforilando el receptor P2X3 suprime la señalización del dolor. En este estudio utilicé modelos de homología, docking proteína-proteína e in-silico alanine-scanning para identificar los residuos importantes en la interacción Csk/P2X3. Subsecuentemente, las predicciones fueron validadas por alanine-scanning experimental. Combinando el estudio experimental y teórico demostramos que la región de docking de la Csk del receptor P2X3 es requerido para la fosforilación de la tirosina.

Durante la instancia postdoctoral me integré al estudio del dominio de membrana de las ATP-sintasas, centrandome en la especificidad iónica (sodio vs. protones) de estas enzimas.

En la primera línea hemos dado respuesta a una cuestión de larga data en el campo: si los protones se unen al anillo-c como hidronio o por protonación de una cadena lateral. Si bien, previos estudios cristalográficos y simulativos apoyaban el último mecanismo una nueva estructura cristalográfica re-abrió esta controversia (Preis et al, 2010). Utilizando dinámica clásica y cuántica demostramos que la coordinación del ión en esa estructura corresponde a un carboxilato protonado, sosteniendo la noción que la protonación del carboxilato es el mecanismo universal por el cual los protones se unen al complejo de membrana de las ATP-sintasas.

También, dentro esta línea, con el grupo del Prof. Volker Müller, estudiamos la ATP-sintasa del archea Methanosarcina acetivorans. Los experimentos demostraron que esta enzima está acoplada al transporte concomitante de iones H<sup>+</sup> y Na<sup>+</sup>. Esta observación es racionalizada por nuestras simulaciones de energía libre en términos de selectividad del sitio de unión del ión en el anillo-c. De esta manera la ATP-sintasa de M.acetivorans puede utilizar los dos gradientes de sodio y protones que resultan de la metanogénesis.

Finalmente realicé experimentos en el laboratorio del Dr. Thomas Meier. A partir de la titulación calorimétrica del anillo-c purificado de la bacteria Ilyobacter tartaricus determiné su selectividad sodio vs proton. Comparando los valores experimentales y computacionales racionalizamos la selectividad ionica de la ATP sintasa y proponemos que este principio de selectividad probablemente sea extendible otras familias de transportadores y enzimas acoplados a el gradiente de sodio y protones.

## Producción bibliográfica

### ARTÍCULOS PUBLICADOS

#### ARBITRADOS

##### **HIV-1 Integrase Binding to its Cellular Partners: A Perspective from Computational Biology. (Completo, 2014)**

QUY VC , CARNEVALE V , MANGANARO L , LUSIC M , ROSSETTI G , VANESSA LEONE , FENOLLAR-FERRER C , RAUGEI S , DEL SAL G , GIACCA M , PAOLO CARLONI

Current pharmaceutical design, v.: 20 21 , p.:3412 - 3421, 2014

Palabras clave: modelo de homología docking proteína/proteína

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 13816128

Scopus<sup>®</sup>

##### **A New Type of Na<sup>+</sup>-Driven ATP Synthase Membrane Rotor with a Two-Carboxylate Ion-Coupling Motif (Completo, 2013)**

S SCHULZ , M IGLESIAS-CANS , ALEXANDER KRAH , Ö YILDIZ , VANESSA LEONE , D MATTHIES

, G M COOK , JOSE D. FARALDO-GOMEZ , THOMAS MEIER  
PLos Biology, v.: 11 6 , p.:1001596 2013  
Palabras clave: ATP synthase  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 15449173  
<http://www.plosbiology.org/article/info%3Adoi%2F10.1371%2Fjournal.pbio.1001596>  
Scopus®

**A promiscuous archaeal ATP synthase concurrently coupled to Na<sup>+</sup> and H<sup>+</sup> translocation (Completo, 2012)** Trabajo relevante

KATHARINA SCHLEGEL , VANESSA LEONE , JOSÉ D. FARALDO-GÓMEZ , VOLKER MÜLLER  
Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, v.: 109 3 , p.:947 - 952, 2012  
Palabras clave: modelos de homología especificidad ionica de las ATP sintasas free energy perturbation  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / especificidad de las ATP sintasas  
ISSN: 00278424  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Engineering rotor ring stoichiometries in the ATP synthase (Completo, 2012)**

DENYS POGORYELOV , ADRIANA L. KLYSZEJKO , GANNA O. KRASNOSELSKA , EVA-MARIA HELLER , VANESSA LEONE , JULIAN D LANGER , JANET VONCK , DANIEL J. MÜLLER , JOSÉ D. FARALDO-GÓMEZ , THOMAS MEIER  
Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, v.: 109 25 E , p.:1599 - 1608, 2012  
Palabras clave: estoquiometria del anillo c de las ATP sintasas  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / simulaciones proteinas de membrana  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 00278424  
DOI: [10.1073/pnas.1120027109](https://doi.org/10.1073/pnas.1120027109)  
<http://www.pnas.org/content/109/25/E1599.long>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**A c subunit with four transmembrane helices and one ion (Na<sup>+</sup>) binding site in an archaeal ATP synthase: implications for c ring function and structure (Completo, 2012)**

FLORIAN MAYER , VANESSA LEONE , JULIAN D. LANGER , JOSE D. FARALDO-GOMEZ , VOLKER MÜLLER  
Journal of Biological Chemistry, v.: 287 47 , p.:39327 - 39337, 2012  
Palabras clave: ATP sintasa especificidad ionica  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / simulaciones proteinas de membrana  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 00219258  
<http://intl.jbc.org/content/early/2012/09/24/jbc.M112.411223.abstract>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**MolecularDescription of the Propagation of Chirality from Molecules to Complex Systems: Different Mechanisms Controlled by Hydrophobic Interactions (Completo, 2012)**

FABRIZIO MARINELLI , ALESSANDRO SORRENTI , VALENTINA CORVAGLIA , VANESSA LEONE , GIOVANNA MANCINI  
Chemistry-A European Journal, v.: 18 46 , p.:14680 - 14688, 2012  
Palabras clave: transferimiento de quiralidad  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica /  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 09476539  
<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/chem.201202342/abstract>  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Targeting biomolecular flexibility with metadynamics (Completo, 2010)** Trabajo relevante

VANESSA LEONE, FABRIZIO MARINELLI, PAOLO CARLONI, MICHELE PARRINELLO

Current Opinion in Structural Biology, v.: 20 2, p.:148 - 154, 2010

Palabras clave: metadinamica aplicada a sistemas biologicos

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / simulaciones moleculares, metodos de energia libre

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 0959440X

DOI: [10.1016/j.sbi.2010.01.011](https://doi.org/10.1016/j.sbi.2010.01.011)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0959440X1000014X>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**On the question of hydronium binding to ATP-synthase membrane rotors (Completo, 2010)** Trabajo relevante

VANESSA LEONE, ALEXANDER KRAH, JOSÉ D. FARALDO-GÓMEZ

Biophysical Journal, v.: 99 7, 2010

Palabras clave: especificidad ionica de las ATP sintasas dinamica cuantica (metodo ADMP) dinamica clasica de proteinas de membrana

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / dinamica clasica y cuantica (DFT-ADMP)

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00063495

DOI: [10.1016/j.bpj.2010.07.046](https://doi.org/10.1016/j.bpj.2010.07.046)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0006349510009185>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**The C-terminal Src Inhibitory Kinase (Csk)-mediated Tyrosine Phosphorylation Is a Novel Molecular Mechanism to Limit P2X3 Receptor Function in Mouse Sensory Neurons (Completo, 2009)**

MARIANNA DARCO, RASHID GINIATULLIN, VANESSA LEONE, PAOLO CARLONI, NICOL BIRSA, ASHA NAIR, ANDREA NISTRI, ELSA FABBRETTI

Journal of Biological Chemistry, v.: 284 32, p.:21393 - 21401, 2009

Palabras clave: docking proteina-proteina regulacion del receptor del dolor P2X3 modelado de homologia in-silico alanine scanning

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / modelado de homologia e interaccion proteina-proteina

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / regulacion de receptores del dolor

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00219258

DOI: [10.1074/jbc.M109.023051](https://doi.org/10.1074/jbc.M109.023051)

<http://www.jbc.org/content/284/32/21393.long>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Mechanism of Action of Cyclophilin A Explored by Metadynamics Simulations (Completo, 2009)** Trabajo relevante

VANESSA LEONE, GIANLUCA LATTANZI, CARLA MOLTENI, PAOLO CARLONI

PLOS Computational Biology, v.: 5 3, p.:1000309 2009

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Simulaciones de enhanced sampling

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / mecanismo molecular enzimatico

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 1553734X

DOI: [10.1371/journal.pcbi.1000309](https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1000309)

<http://www.ploscompbiol.org/article/info%3Adoi%2F10.1371%2Fjournal.pcbi.1000309>

Scopus®

**ARTÍCULOS ACEPTADOS**

**ARBITRADOS**

**On the principle of ion selectivity in Na<sup>+</sup>/H<sup>+</sup>-coupled membrane proteins: experimental and**

**theoretical studies of an ATP synthase rotor (Completo, 2015)** Trabajo relevante

VANESSA LEONE, DENYS POGORYELOV, THOMAS MEIER, JOSE FARALDO-GOMEZ

Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, 2015

Palabras clave: Na<sup>+</sup>/H<sup>+</sup> selectivity of membrane transporters

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Estados Unidos de America

Fecha de aceptación: 26/01/2015

ISSN: 00278424

## Evaluaciones

### EVALUACIÓN DE PUBLICACIONES

#### COMITÉ EDITORIAL

##### **BMC Structural Biology (2014 / 2014)**

Cantidad: Menos de 5

##### **PLOS ONE (2012 / 2012)**

Cantidad: Menos de 5

##### **Journal of Molecular Modeling Journal of Molecular Modeling (2010 / 2010)**

Cantidad: Menos de 5

## Otros datos relevantes

### PRESENTACIONES EN EVENTOS

#### **59th Biophysical Society Annual Meeting (2014)**

Congreso

On the Na<sup>+</sup>/H<sup>+</sup> selectivity of membrane transporters and enzymes: experimental and theoretical studies of an atp-synthase rotor ring

Estados Unidos

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 1

Nombre de la institución promotora: Biophysical Society

Abstract seleccionado para presentación oral en la plataforma "Membrane Pumps, Transporters, and Exchangers II"

#### **Biophysical Society Meeting (2014)**

Congreso

Moderador en la plataforma "Membrane Pumps, Transporters, and Exchangers II" del 59th

Biophysical Society Annual Meeting

Estados Unidos

Tipo de participación: Moderador

Carga horaria: 1

Nombre de la institución promotora: Biophysical Society

#### **Permeation and Transport Subgroup Session of the Annual Meeting of the Biophysical Society (2014)**

Congreso

Ion selectivity of an ATP-synthase membrane rotor determined by Isothermal Titration

Calorimetry

Estados Unidos

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 1



Nombre de la institución promotora: Permeation and Transport Subgroup of Biophysical Society  
Abstract seleccionado para presentación oral como "Postdoc Research Highlight"  
<http://www.biophysics.org/2014meeting/Program/Subgroups/PermeationTransport/tabid/4258/Default.aspx>

#### **Gordon Research Conference in Bioenergetics (2013)**

Congreso  
Determination of the ion selectivity of the I. tartaricus c-ring by Isothermal Titration Calorimetry.  
Estados Unidos  
Tipo de participación: Poster  
Carga horaria: 40  
Nombre de la institución promotora: Gordon Research  
Poster seleccionado para exposición oral.

#### **Seminario del Master en Bioinformatica (2012)**

Seminario  
Especificidad iónica y mecanismos de transporte de los motores de membrana de la ATP sintasa.  
Uruguay  
Tipo de participación: Expositor oral  
Carga horaria: 1  
Nombre de la institución promotora: Universidad de la Republica

#### **Seminarios en Institut Pasteur de Montevideo. (2012)**

Seminario  
On the structure and mechanism of the membrane domain of rotary ATPases.  
Uruguay  
Tipo de participación: Expositor oral  
Carga horaria: 1  
Nombre de la institución promotora: Pasteur Institut Montevideo

#### **Biophysical Society 55th Annual Meeting (2011)**

Congreso  
Revisiting Boyer Hydronium Hypothesis: On the Mechanism of Proton Binding to ATP Synthase Membrane Rotors  
Estados Unidos  
Tipo de participación: Poster  
Nombre de la institución promotora: Biophysical Society  
Titulo Poster: Revisiting Boyer Hydronium Hypothesis: On the Mechanism of Proton Binding to ATP Synthase Membrane Rotors. V. Leone, A. Krah, J.D. Faraldo-Gómez. Titulo Poster: Structural and Physiological Factors Controlling the Ion Specificity of ATP Synthase Membrane Rotors. J.D. Faraldo-Gómez, A. Krah, V. Leone, F. Roessler.

#### **Bionergetics Gordon Research Conference (2011)**

Congreso  
Structural model of an ATP-synthase a/c-subunit complex based on experimental cross-linking and accessibility data  
Estados Unidos  
Tipo de participación: Poster  
Titulo Poster: Structural model of an ATP-synthase a/c-subunit complex based on experimental cross-linking and accessibility data. V. Leone, R. Fillingame, J.D. Faraldo-Gómez.

#### **Lausanne Biomolecular Modelling Seminars, CECAM invited seminar (2011)**

Seminario  
Ion specificity and transport mechanism of the membrane motor of ATP synthase.  
Suiza  
Tipo de participación: Conferencista invitado  
Nombre de la institución promotora: Swiss Institute of Bioinformatics.

#### **16th. European Bioenergetics Conference (2010)**

Congreso  
On the question of hydronium binding to ATP-synthase Membrane rotors  
Polonia  
Tipo de participación: Poster  
Titulo del poster: On the question of hydronium binding to ATP-synthase Membrane rotors. V.

Leone, A. Krah, J.D. Faraldo- Gómez.

#### **Oswalt colloquium (2010)**

Simposio

On the question of hydronium binding to ATP-synthase membrane rotors

Alemania

Tipo de participación: Expositor oral

Nombre de la institución promotora: Max Planck Institute of Biophysics

#### **VIII European Symposium of the Protein Society. (2009)**

Congreso

Mechanism of Action of Cyclophilin A Explored by Metadynamics Simulations

Suiza

Tipo de participación: Poster

Título del poster: Mechanism of Action of Cyclophilin A Explored by Metadynamics Simulations. V.

Leone, G. Lattanzi, C. Molteni, P. Carloni.

#### **Conference on Drug Development for the Third World (2006)**

Congreso

Characterizing Molecular Targets for Early Inhibition of in vivo Maillard Reactions.

Italia

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: International Centre for Theoretical Physics

Título del poster: Characterizing Molecular Targets for Early Inhibition of in vivo Maillard

Reactions. V. Leone and E.L. Coitiño.

#### **XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2002)**

Congreso

Glucosilacion no enzimatica de Proteinas: mecanismo de las etapas tempranas del procesos y la inhibicion de la formacion de AGEs por etanol.

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Asociación Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina Actuación

Título del poster: Glucosilacion no enzimatica de Proteinas: mecanismo de las etapas tempranas del procesos y la inhibicion de la formacion de AGEs por etanol. V. Leone and E.L Coitiño

## **Indicadores de producción**

<b>PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>11</b>
<b>Artículos publicados en revistas científicas</b>	10
Completo	10
<b>Artículos aceptados para publicación en revistas científicas</b>	1
Completo	1
<b>EVALUACIONES</b>	<b>3</b>
<b>Evaluación de publicaciones</b>	3