



**ESTELLA CAROLINA  
FONTANA MALÁN**

PhD

[cfontan@fq.edu.uy](mailto:cfontan@fq.edu.uy)  
<http://dql.cup.edu.uy>

Departamento de Química del Litoral, Polo Agroalimentario y Agroindustrial, Estación Experimental Mario A. Cassinoni, Ruta 3 Km 363, Paysandú, Uruguay  
47227950 ext 131

### 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/ Departamento de Química del Litoral (CENUR Litoral Norte) / Uruguay

### DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Universidad de la República / Centro Universitario Regional Litoral Norte / Sector Educación Superior/Público  
Dirección: Departamento de Química del Litoral / Polo Agroalimentario y Agroindustrial, Estación Experimental Mario A. Cassinoni, Ruta 3 Km 363 / 60000 / Paysandú , Salto , Uruguay  
Teléfono: (598) 47227950 / 131  
Correo electrónico/Sitio Web: [cfontan@fq.edu.uy](mailto:cfontan@fq.edu.uy) [dql.cup.edu.uy](http://dql.cup.edu.uy)

## Formación

### Formación académica

#### CONCLUIDA

#### DOCTORADO

##### Doctorado en Química Orgánica (2009 - 2013)

Stockholm University , Suecia  
Título de la disertación/tesis: NMR spectroscopy in structural and conformational analysis of bacterial polysaccharides  
Tutor/es: Göran Widmalm  
Obtención del título: 2013  
Sitio web de la disertación/tesis: <http://urn.kb.se/resolve?urn=urn:nbn:se:su:diva-93833>  
Institución financiadora: European Commission - Marie Curie , Suecia  
Palabras Clave: Resonancia Magnética Nuclear Carbohidratos lipopolisacárido polisacárido O-antigénico gram-negative bacteria  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

#### MAESTRÍA

##### Licenciatura en Química Orgánica (2009 - 2012)

Stockholm University , Suecia  
Título de la disertación/tesis: Structural Studies of Glycans by NMR spectroscopy  
Tutor/es: Göran Widmalm  
Obtención del título: 2012  
Sitio web de la disertación/tesis: <http://urn.kb.se/resolve?urn=urn:nbn:se:su:diva-75652>  
Institución financiadora: European Commission - Marie Curie , Suecia  
Palabras Clave: Resonancia Magnética Nuclear Carbohidratos polisacárido O-antigénico configuración absoluta glicopéptidos  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Resonancia Magnética Nuclear  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

### **Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA) (2006 - 2009)**

Universidad de la República - Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay  
Título de la disertación/tesis: Estudios Sintéticos y Estructurales de Análogos Funcional y Topológicamente Simplificados de Metabolitos Marinos Activos  
Tutor/es: Eduardo Manta / Guillermo Moyna  
Obtención del título: 2009  
Sitio web de la disertación/tesis: <http://riquim.fq.edu.uy/items/show/711>  
Institución financiadora: Agencia Nacional de Investigación e Innovación / Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay  
Palabras Clave: Phorboxazoles Resonancia Magnética Nuclear Diels-Alder Reacción de Prins  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis Orgánica  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Medicinal

### **GRADO**

#### **Química Farmacéutica (2003 - 2005)**

Universidad de la República - Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay  
Título de la disertación/tesis:  
Obtención del título: 2005  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica /

#### **Bachiller en Química (1999 - 2002)**

Universidad de la República - Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay  
Título de la disertación/tesis:  
Obtención del título: 2002  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica /

## Formación complementaria

### **CONCLUIDA**

### **POSDOCTORADOS**

#### **Characterization of Transient Structures of Helix-44 of the 16S Ribosomal Subunit by NMR Spectroscopy (2014 - 2015)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Karolinska Institutet, Suecia  
Palabras Clave: Resonancia Magnética Nuclear miRNA rRNA RNA ribosomal 16SRelajación R1rho  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biología estructural  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

### **CURSOS DE CORTA DURACIÓN**

#### **Automating NMR workflows: Introduction to python programming (dictado en el Swedish NMR centre) (01/2014 - 01/2014)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad de Gotemburgo, Suecia  
16 horas  
Palabras Clave: Resonancia Magnética Nuclear Python programación  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación /  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

#### **Advanced Physical Organic Chemistry (01/2011 - 01/2011)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Stockholm University, Suecia

42 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica /

**Biomolecular NMR (01/2010 - 01/2010)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Stockholm University , Suecia

94 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

**NMR Characterization of Protein Dynamics and Structure: Residual Dipolar Couplings and Heteronuclear Relaxation Techniques (01/2008 - 01/2008)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de Rosario , Argentina

30 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

**Síntesis Total y Escalado. Epsilon y Discodermolide: Modo de acción y desarrollo de rutas sintéticas (01/2007 - 01/2007)**

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

20 horas

Áreas de conocimiento:

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

**Diseño de fármacos (01/2007 - 01/2007)**

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

8 horas

Áreas de conocimiento:

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

**Estrategias en el diseño de compuestos bioactivos (01/2006 - 01/2006)**

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

60 horas

Áreas de conocimiento:

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

**Espectroscopía RMN avanzada (01/2006 - 01/2006)**

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

20 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

**Understanding Pulse Sequence in Modern Protein NMR (01/2006 - 01/2006)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Facultad de Ciencias Bioqcs. y Farmac.- UNR, Argentina

36 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

**Síntesis de Productos Naturales Bioactivos (01/2006 - 01/2006)**

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

30 horas

Áreas de conocimiento:

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

**Jornadas Iberoamericanas de RMN. Avances en RMN e interacciones moleculares (01/2005 - 01/2005)**

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Centro de Formación de la Cooperación Española, Bolivia  
40 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

**Modelado Molecular I (01/2005 - 01/2005)**

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

120 horas

Áreas de conocimiento:

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

**Cursillo Teórico de Resonancia Magnética Nuclear (01/2004 - 01/2004)**

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

12 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

**Elucidación Estructural (01/2003 - 01/2003)**

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

50 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

**Actualización de técnicas para el estudio de moléculas bioactivas: EPR y NMR de moléculas paramagnéticas (01/2003 - 01/2003)**

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

20 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

**Resonancia Magnética Nuclear Avanzado (01/2002 - 01/2002)**

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

20 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

**PARTICIPACIÓN EN EVENTOS**

**5to Encuentro Nacional de Química (ENAQUI) (2017)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: PEDECIBA Química, Uruguay

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

**Integrative methods in Structural Biology to enhance high impact research in health and disease (2016)**

Tipo: Taller

Institución organizadora: Instituto Pasteur Montevideo, Uruguay  
Palabras Clave: Biología Estructural Criomicroscopía electrónica  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biología estructural

**19th Annual Conference of the Swedish Biology Network (2015)**

Tipo: Congreso  
Institución organizadora: Structural Biology Network (Suecia), Suecia  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biología estructural  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

**Euromar 2013 (European magnetic Resonance Meeting) (2013)**

Tipo: Congreso

**54th ENC (Experimental NMR Conference) (2013)**

Tipo: Congreso  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

**26th International Carbohydrate Symposium (2012)**

Tipo: Congreso  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

**International Glycomics Symposium - Increasing the Impact of Glycoscience through New Tools and Technologies (2012)**

Tipo: Congreso  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

**52nd ENC (Experimental NMR Conference) (2011)**

Tipo: Congreso  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

**Summer Course Glycosciences (2010)**

Tipo: Congreso  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

**4th Baltic Meeting on Microbial Carbohydrates (2010)**

Tipo: Congreso  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

**I Reunión Latinoamericana de Química Medicinal (2007)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Cátedra de Química Farmacéutica, Facultad de Química, Uruguay

Areas de conocimiento:

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

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

#### **11th Nuclear Magnetic Resonance User Meeting, Workshop in South America (2007)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Associação de Usuários de Ressonância Magnética Nuclear, Brasil

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

#### **V Reunión de la Sociedad Latinoamericana de Fitoquímica. I Congreso de Fitoterápicos del Mercosur (2005)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: Presidente de la Sociedad Latinoamericana de Fitoquímica, Uruguay

Areas de conocimiento:

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

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

#### **XII Jornadas de Jóvenes Investigadores de la Asociación de Universidades del Grupo Montevideo (2004)**

Tipo: Congreso

Institución organizadora: AUGM, Brasil

Areas de conocimiento:

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

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

## **Idiomas**

### **Inglés**

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

### **Sueco**

Entiende regular / Habla regular / Lee regular / Escribe regular

### **Español**

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

## **Areas de actuación**

### **CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS**

Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

### **CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS**

Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

### **CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS**

Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

### **CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS**

Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Biología estructural

## **Actuación profesional**

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

Facultad de Química - UDeLaR

## VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

### **Funcionario/Empleado (10/2015 - a la fecha)**

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

### **Becario (01/2008 - 07/2009)**

Estudiante de Posgrado ,40 horas semanales  
Becario de Posgrado de la ANII  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

### **Funcionario/Empleado (10/2008 - 12/2008)**

Ayudante ,20 horas semanales  
Ayudante del Departamento de Química Orgánica (DQO)  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

### **Becario (07/2008 - 09/2008)**

Ayudante ,20 horas semanales  
Asistente del Laboratorio de Carbohidratos y Glicoconjugados (Fundación Manuel Pérez)  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

### **Funcionario/Empleado (03/2008 - 07/2008)**

Ayudante ,20 horas semanales  
Ayudante del Departamento de Química Orgánica (DQO)  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

### **Becario (07/2007 - 12/2007)**

Estudiante de Posgrado ,40 horas semanales  
Becario de Posgrado de PEDECIBA Química  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

### **Becario (03/2007 - 07/2007)**

Ayudante ,20 horas semanales  
Ayudante de la Cátedra de Química Farmacéutica, DQO, Facultad de Química (Proyecto FCE 10050)  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

### **Becario (03/2007 - 06/2007)**

Estudiante de Posgrado ,36 horas semanales  
Beca de Posgrado de Facultad de Química  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

### **Colaborador (08/2002 - 03/2007)**

Ayudante Honorario ,6 horas semanales

Ayudante Honorario del Laboratorio de Resonancia Magnética Nuclear  
Escalafón: No Docente  
Cargo: Interino

**Becario (02/2006 - 02/2007)**

Ayudante ,30 horas semanales  
Ayudante de la Cátedra de Química Farmacéutica, DQO, Facultad de Química (Proyecto FCE 10050)  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

**Colaborador (04/2004 - 04/2006)**

Ayudante Honorario ,6 horas semanales  
Ayudante Honorario de la Cátedra de Química Farmacéutica (DQO)  
Escalafón: No Docente  
Cargo: Interino

**Becario (02/2005 - 12/2005)**

Ayudante ,20 horas semanales  
Ayudante del Laboratorio de Carbohidratos y Glicoconjugados, DQO. (Proyecto PDT 29/135)  
Escalafón: Docente  
Grado: Grado 1  
Cargo: Interino

**Colaborador (09/2004 - 01/2005)**

Ayudante Honorario ,6 horas semanales  
Ayudante Honorario del Laboratorio de Carbohidratos y Glicoconjugados (Proyecto FCE 8283)  
Escalafón: No Docente  
Cargo: Interino

**ACTIVIDADES**

**LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN**

**Desarrollo y optimización de técnicas para el análisis de carbohidratos y glicoconjugados. (10/2015 - a la fecha)**

Fundamental  
40 horas semanales  
Departamento de Química del Litoral (CENUR Litoral Norte), Laboratorio de Espectroscopia y Físicoquímica Orgánica , Coordinador o Responsable  
Equipo:  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

**Análisis estructural y fisicoquímico de carbohidratos, glicoconjugados y otros productos naturales de relevancia biológica y biotecnológica (10/2015 - a la fecha)**

Mixta  
20 horas semanales  
Departamento de Química del Litoral (CENUR Litoral Norte), Laboratorio de Espectroscopia y Físicoquímica Orgánica , Coordinador o Responsable  
Equipo:  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados



## PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

### Estudio de aspectos estructurales y conformacionales del polisacárido C de *S. pneumoniae* mediante el empleo de técnicas de resonancia magnética nuclear (04/2017 - a la fecha)

El *Streptococcus pneumoniae* es un importante patógeno Gram-positivo responsable de la mayoría de los casos de neumonía a nivel mundial. El polisacárido capsular (CPS) de estos organismos es considerado un factor de virulencia importante asociado a cepas patogénicas pero, dado el gran número de diferentes serotipos, la formulación de una vacuna contra todas las cepas patogénicas conocida de esta bacteria presenta enormes dificultades tecnológicas y económicas. Aparte del CPS (específico de cada serotipo), las cepas de *S. pneumoniae* despliegan en su superficie el polisacárido C (ácido teicoico, PS-C). Como este polisacárido (PS) es un antígeno común a toda la especie (y un contaminante frecuente en las vacunas contra *S. pneumoniae*), una completa caracterización química y fisicoquímica de estos polímeros es de fundamental importancia para entender la reactividad inmunológica en el huésped, tanto frente al patógeno como su respuesta frente a la inmunización con distintas vacunas comerciales o experimentales. Desde hace ya varias décadas se sabe que el PS-C está unido covalentemente a la pared de peptidoglicano (PG), pero la descripción química detallada de esta unión aún es desconocida. Los procesos de obtención de este PS, al igual que los de los CPSs, se basan en la lisis del PG usando enzimas específicas y, dependiendo de la eficiencia de dichos procesos, se puede llegar a obtener fragmentos de PG de tamaño significativo. Como consecuencia de esto último, pueden haber fragmentos de PG que tengan unidas más de una cadena de PSs. Es decir, que a pesar de que las cadenas de PS-C tienen un peso molecular muy diferente al del CPS (aprox. 20 y 1000 kDa, respectivamente), éste no puede ser removido por métodos cromatográficos dado la característica de la unión (covalente) al mismo fragmento de PG. El acceso a información detallada sobre la unión del PS-C al PG podría contribuir enormemente al desarrollo de técnicas más selectivas para la liberación de dicho polímero de la pared celular, de modo de obtener preparaciones más homogéneas tanto de CPSs como de PS-C. En el transcurso de este proyecto se busca caracterizar esa unión, y desarrollar metodologías para el estudio de diferentes preparaciones de PS-C. Con respecto a este último punto, se apunta a la caracterización de las macroestructuras generadas mediante el tratamiento enzimático, lo que implica además la determinación de su tamaño global, así como también el de las cadenas de PS-C, y del fragmento de PG remanente en el extremo reductor de las mismas. Se busca determinar el número de cadenas de PS-C unidas al mismo fragmento de PG y el espaciamiento entre cadenas proximales. Se trabaja además en el estudio de las preferencias conformacionales del PS-C y su dinámica usando técnicas de espectroscopía de RMN y material isotópicamente enriquecido en  $^{13}\text{C}$  y  $^{15}\text{N}$ , lo que permitirá evaluar el grado de compactación de las cadenas proximales, y posibles interacciones entre ellas. Financiación: Proyecto CSIC I+D 1503, convocatoria 2016 (Monto: \$U 1.000.000).

20 horas semanales

Departamento de Química del Litoral, Laboratorio de Espectroscopia y Fisicoquímica Orgánica  
Desarrollo

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado: 1

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: GUILLERMO MOYNA, MARÍA INÉS BESSIO., FERREIRA, F., C. FONTANA (Responsable), ANA INÉS CATALÁN (Responsable), GUALBERTO BOTTINI

Palabras clave: RMN Polisacárido *S. pneumoniae*

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoproteínas

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

### Obtención y caracterización estructural de lipopolisacáridos de *Leptospira* (10/2017 - a la fecha)

La leptospirosis es una zoonosis de amplia distribución geográfica, que representa un serio riesgo sanitario para los trabajadores rurales, causando también importantes perjuicios económicos en el agro por pérdidas en la producción ganadera lechera y de carne. Si bien a nivel nacional e internacional un número importante de grupos de investigación están enfocados en el estudio de cepas de *Leptospira*, muchos se desvuelven en el área microbiológica, bioquímica y/o estructural de proteínas, pero muy poco se ha trabajado y es conocido sobre la estructura de los antígenos O-específicos que conforman los diferentes lipopolisacáridos (LPS). Estos polisacáridos (PS) son factores de virulencia relevantes, llegando a definir más de 250 serovares de *Leptospira* en base a la reactividad serológica de los mismos; esto es una consecuencia directa de la variabilidad estructural de estas biomoléculas. A pesar de su importancia, hasta el momento solo se ha reportado la estructura del antígeno O-específico de un único serovar de *Leptospira*, y los estudios restantes solo se han enfocado en la determinación de los azúcares que componen estos polímeros,

pero no en una elucidación estructural detallada. En este proyecto se está trabajando en la obtención, purificación y caracterización de los antígenos O-específicos de aislamientos de *Leptospira* disponibles en el cepario del Instituto de Higiene. Los materiales purificados pretenden ser usados en etapas futuras en el desarrollo de vacunas conjugadas y métodos de diagnóstico. El conocimiento de las estructuras químicas de las cadenas O-específicas, y la identificación de los clústeres de genes involucrados en la biosíntesis de los mismos, pretenden ser el punto de partida para comenzar a desarrollar una base de datos estructural de antígenos O-específicos de cepas patogénicas de *Leptospira*. Financiación: ANII, Fondo María Viñas Nro. FMV\_1\_2017\_1\_135751 (monto: \$ 1.300.000 y un becario de doctorado)

10 horas semanales

Departamento de Química del Litoral , Laboratorio de Espectroscopia y Físicoquímica Orgánica Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Doctorado:1

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: GUILLERMO MOYNA , MARÍA INÉS BESSIO. , Fernando Amaury FERREIRA CHIESA , GUSTAVO VARELA (Responsable)

Palabras clave: lipopolisacárido *Leptospira*

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

#### **Desarrollo de Potenciales Fármacos Antihelmínticos Basado en Simplificaciones Funcionales y Topológicas de Productos Naturales Biocativos de Origen Marino (FCE 10050) (02/2006 - 07/2007 )**

El principal objetivo de este proyecto (FCE-10050) era el desarrollo de análogos simplificados de metabolitos marinos biológicamente activos como potenciales fármacos antihelmínticos. Se llevó a cabo la síntesis de compuestos con estructuras oxano-oxazol (análogas a los Phorboxazoles) mediante metodologías de ciclación de Prins y hetero Diels-Alder. Además, se realizaron extensivos estudios estructurales y conformacionales de compuestos sintetizados dentro de nuestro grupo de investigación usando espectroscopía de resonancia magnética nuclear. Se llevó a cabo la preparación del primer informe de avance y el informe final del proyecto, presentados a la agencia financiadora (DINACYT). Tres publicaciones en revistas arbitradas resultaron de mis contribuciones a este proyecto (ver en lista de publicaciones: Fontana et al. (2008) MRC; Incerti et al. (2008) Heterocycles; Fontana et al. (2010) Tetrahedron-Asymmetry).

30 horas semanales

Departamento de Química Orgánica , Cátedra de Química Farmacéutica Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Maestría/Magister:1

Doctorado:2

Equipo: LAURA SCARONE , EDUARDO MANTA (Responsable) , MARCELO INCERTI , L. DOMÍNGUEZ

Areas de conocimiento:

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

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

#### **Bases químicas para la elucidación de la función biológica del myo-inositol hexakisfosfato (PDT Nro. 29/135) (02/2005 - 12/2005 )**

Dentro del contexto de este proyecto se desempeñaron las tareas de: preparación de complejos metálicos de inositol hexakisfosfato con iones metálicos divalentes, y caracterización de los mismos por RMN. Las tareas se realizaron dentro de un proyecto PDT (no. 29/135) otorgado al Prof. Carlos Kremer.

20 horas semanales

Departamento de Química Orgánica , Laboratorio de Carbohidratos y Glicoconjugados Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Equipo: FERREIRA, F. , KREMER, C. (Responsable) , A. DIAZ , C. FONTANA

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

**Inositosomas del parásito Echinococcus granulosus: caracterización y evaluación de potencial antiinflamatorio (FCE 8283) (09/2004 - 01/2005)**

Dentro del contexto de este proyecto se desempeñaron las tareas de: realización de espectros de RMN de inositosomas purificados e identificación del inositol pentakisfosfato presente en ellos. Los resultados obtenidos durante este proyecto fueron reportados como parte de un artículo en una revista arbitrada (ver Casaravilla et al. (2006) FEBS Journal en la lista de publicaciones)

4 horas semanales

Departamento de Química Orgánica, Laboratorio de Carbohidratos y Glicoconjugados  
Investigación

Otros

Concluido

Equipo: Cecilia CASARAVILLA GÓMEZ, Silvia SOULE DIAZ, MARÍA INÉS BESSIO., Fernando Amaury FERREIRA CHIESA, KREMER, C., A. DIAZ (Responsable), M. BONILLA, F. IRIGOÍN, M.N. ALVAREZ, R. DURÁN

Áreas de conocimiento:

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

**DOCENCIA**

**Químico- Orientación Agrícola y Medio Ambiente (08/2017 - a la fecha)**

Grado

Responsable

Asignaturas:

Química General 2, 3 horas, Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Ciencias Químicas /

**Química (03/2016 - a la fecha)**

Grado

Responsable

Asignaturas:

Determinación Espectroscópica de Compuestos Orgánicos (Química Orgánica 104) - Paysandú, 6 horas, Teórico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica /

**Química (03/2008 - 07/2008)**

Grado

Asistente

Asignaturas:

Química Orgánica 103 (QO103), 10 horas, Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica /

**Química (10/2006 - 10/2006)**

Grado

Invitado

Asignaturas:

Elucidación Estructural, 4 horas, Teórico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

**Química (03/2004 - 07/2006)**

Grado

Asistente

Asignaturas:

Química Farmacéutica 102 (QF102) - hemisemestral, 12 horas, Práctico  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica /

#### **Química (10/2004 - 10/2004)**

Grado  
Invitado  
Asignaturas:  
Elucidación Estructural, 4 horas, Teórico  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

#### **CAPACITACIÓN/ENTRENAMIENTOS DICTADOS**

##### **DEPTEQ (01/2007 - 01/2008)**

Entrenamiento y capacitación de la Bach. Adriana García, en su trabajo práctico de licenciatura:  
"Estudios Estructurales de los Polisacáridos de las Harinas de Maíz por Disolución en Líquidos Iónicos y RMN - (1 hs.)  
1 hora semanales

Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

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

Centro Universitario Regional Litoral Norte

#### **VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

##### **Otro (10/2015 - a la fecha)**

Profesor Adjunto / Dedicación total  
Si bien el cargo que usufructo es a través de la Facultad de Química (referencia académica) realizo mis funciones docentes y de investigación en el Departamento de Química del Litoral del CENUR Litoral Norte - sede Paysandú.  
Escala: Docente  
Grado: Grado 3  
Cargo: Efectivo

#### **ACTIVIDADES**

##### **PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO**

##### **Ampliación de las capacidades del espectrómetro de RMN Bruker Avance III 500 MHz para la obtención de experimentos de triple resonancia relevantes para el estudio de biomoléculas (06/2018 - a la fecha)**

La Resonancia magnética nuclear (RMN) es una de las técnicas más poderosas para el estudio estructural y conformacional de moléculas orgánicas en solución. Más allá de la espectroscopía tradicional de  $^1\text{H}$  y  $^{13}\text{C}$ , ampliamente utilizada en el área de la química orgánica, la posibilidad de incorporar información espectroscópica de núcleos de  $^{15}\text{N}$  y  $^{31}\text{P}$  cobra amplia relevancia en el estudio de una gran variedad de biomoléculas. En nuestro laboratorio actualmente se dispone de dos espectrómetros de RMN cuyas capacidades permiten la adquisición de un gran repertorio de experimentos. El espectrómetro de campo más bajo (Bruker Avance III 400 MHz), está equipado con dos canales de radiofrecuencia y una sonda de doble resonancia BBFO Plus que permite la detección directa de un gran número de heteronúcleos (incluyendo  $^2\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{15}\text{N}$ ,  $^{19}\text{F}$ ,  $^{31}\text{P}$ ,  $^{77}\text{Se}$ , etc.). El espectrómetro de campo más alto (Bruker Avance III 500 MHz) es el único en el país que está equipado con tres canales de radiofrecuencia, y posee una sonda inversa de triple resonancia que permite realizar experimentos basados en  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  y  $^{15}\text{N}$  en forma simultánea. En este proyecto se plantea la adquisición de una sonda de triple resonancia para núcleos de  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  y  $^{31}\text{P}$  que permitirá ampliar el repertorio de experimentos que pueden llevar a cabo no solo grupos de nuestro laboratorio, sino que también del resto del país. Esta mejora permitirá obtener espectros bidimensionales de  $^1\text{H}$ - $^{31}\text{P}$  con detección en protón, ofreciendo una mucho mejor sensibilidad de la que se obtiene actualmente con la sonda BBFO Plus instalada en el espectrómetro de RMN de

campo más bajo, y se agregará la posibilidad de adquirir experimentos de triple resonancia, de relevancia para el estudio de muestras enriquecidas isotópicamente en <sup>13</sup>C y que contienen átomos de fósforo en su estructura (por ej. polisacáridos, RNA, etc.).

1 horas semanales

Departamento de Química del Litoral , Laboratorio de Espectroscopia y Físicoquímica Orgánica  
Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Doctorado:2

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: Guillermo Moyna (Responsable) , Estella Carolina FONTANA MALÁN

Palabras clave: fósforo resonancia magnética nuclear RMN biomoléculas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Espectroscopía de RMN

#### **Fortalecimiento de Equipamiento en los Grupos de Investigación en Salud Humana y Animal Instalados en la Sede Paysandú del CENUR Litoral Norte (11/2017 - a la fecha)**

En esta propuesta se solicitó la compra de tres equipos que benefician a los investigadores que se desempeñan en el Área Salud del CENUR Litoral Norte sede Paysandú: 1) un equipo para la adquisición simultánea de múltiples señales biomédicas (BIOPAC MP160), 2) un cromatógrafo preparativo (Äkta Pure), y 3) un autoclave automático. Los proponentes provienen de tres Polos de Desarrollo Universitario (PDUs) diferentes y, además, el proyecto cuenta con el apoyo de grupos docentes de ISEF, EUTM, Facultad de Veterinaria, Facultad de Psicología, Facultad de Agronomía y otros Grupos PDUs.

1 horas semanales

Departamento de Química del Litoral , Laboratorio de Espectroscopia y Físicoquímica Orgánica  
Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Financiación:

Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo: Estella Carolina FONTANA MALÁN , Mauricio Cabrera (Responsable) , Ricardo Armentano

Palabras clave: cromatografía

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Polisacáridos y Glicoconjugados

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

Área Química (PEDECIBA)

#### **VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

**Otro (10/2015 - a la fecha)**

Investigador Activo G3

**Becario (02/2006 - 07/2009)**

Estudiante de Posgrado ,40 horas semanales

#### **ACTIVIDADES**

##### **GESTIÓN ACADÉMICA**

**Representante del orden estudiantil (suplente) al Consejo Científico del Área Química (01/2008 - 12/2008 )**

PEDECIBA Química

Participación en consejos y comisiones

##### **SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - SUECIA**

Karolinska Institutet

## VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

### Becario (08/2014 - 10/2015)

Becario Postdoctoral ,40 horas semanales / Dedicación total

## ACTIVIDADES

### LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

#### Estudios de la dinámica conformacional de RNA no codificantes por resonancia magnética nuclear (08/2014 - 10/2015 )

Se trabajó en esta línea de investigación en el grupo de la Prof. Katja Petzold  
Fundamental

40 horas semanales

Department of Medical Biochemistry and Biophysics, Molecular Structural Biology , Integrante del equipo

Equipo:

Palabras clave: Resonancia Magnética Nuclear RNA RNA ribosomal

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / estructura de ARN no codificantes

### DOCENCIA

#### Study Programme in Medicine (04/2015 - 04/2015 )

Grado

Asistente

Asignaturas:

The Healthy Human 1 - Project Work Cholesterol, 1 horas

Areas de conocimiento:

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

### SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - SUECIA

Stockholms Universitet

## VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

### Funcionario/Empleado (08/2009 - 11/2013)

Estudiante de Doctorado ,40 horas semanales / Dedicación total

Estudiante de doctorado en el grupo del Prof. Göran Widmalm (Departamento de Química Orgánica, Universidad de Estocolmo).

## ACTIVIDADES

### LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

#### Estudios estructurales y conformaciones de polisacáridos bacterianos por resonancia magnética nuclear (08/2009 - 11/2013 )

Fundamental

40 horas semanales

Departamento de Química Orgánica , Integrante del equipo

Equipo: C. FONTANA , MAGNUS LUNDBORG , GÖRAN WIDMALM

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

### PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

## **Development of carbohydrate array technology to systematically explore the functional role of glycans in healthy and diseased states (EuroGlycoArrays) (08/2009 - 07/2012)**

El proyecto EuroGlycoArrays (PEOPLE-2007-1-1-ITN - Marie Curie Action: "Networks for Initial Training") fue financiado por la Comisión Europea (4 millones de euro) para establecer una red de cooperación "Marie Curie Initial Training Network" como parte del programa FP7. El objetivo de este proyecto estaba enfocado en investigación y entrenamiento en el desarrollo de arrays de carbohidratos como una herramienta innovativa para detectar interacciones de carbohidrato-proteína en células y tejidos. Este proyecto estaba coordinado por la Universidad de Manchester e integrado por 16 grupos de investigación europeos tanto académicos como de la industria. ([http://cordis.europa.eu/project/rcn/88952\\_en.html](http://cordis.europa.eu/project/rcn/88952_en.html))

40 horas semanales

Departamento de Química Orgánica

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Financiación:

European Commission - Marie Curie, Suecia, Cooperación

Equipo: C. FONTANA, GÖRAN WIDMALM (Responsable), PAOLA GRASSI, MARKUS AEBI (Responsable), ANITA SARKAR, SERGE PÉREZ (Responsable), SABINE FLITSCH (Responsable), NICOLAI BOVIN (Responsable), NIELS-CHRISTIAN REICHARDT (Responsable), ANNE DELL (Responsable), OLA BLIXT (Responsable), CARLO UNVERZAGT (Responsable), HELEN OSBORN (Responsable), REINHARD SCHWARTZ-ALBIEZ (Responsable), PETER SEEBERGER (Responsable), DARYL FERNANDEZ (Responsable), GORDAN LAUC (Responsable), JOANNA SIEBENHAAR, BARBARA ADAMCZYK, IRMA MAHMULJIN, SONU KUMAR, PAWEŁ CZECHURA, STJEPAN K. KRAČUN, KOWA CHEN, SHI YAN, ROBERT SARDZIK, MARTIN WEISSENBORN

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

### **GESTIÓN ACADÉMICA**

#### **Tesorera (04/2011 - 02/2013)**

Departamento de Química Orgánica, Consejo de Estudiantes

Participación en consejos y comisiones

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

University of the Sciences in Philadelphia

### **VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN**

#### **Becario (10/2007 - 12/2007)**

Investigador Asociado, 40 horas semanales

### **ACTIVIDADES**

#### **PASANTÍAS**

##### **(10/2007 - 12/2007)**

Department of Chemistry & Biochemistry

40 horas semanales

#### **CARGA HORARIA**

Carga horaria de docencia: 10 horas

Carga horaria de investigación: 30 horas

Carga horaria de formación RRHH: 10 horas

Carga horaria de extensión: Sin horas

Carga horaria de gestión: 10 horas

## **Producción científica/tecnológica**

Desde el año 2005 he estado involucrada en diferentes proyectos de investigación que me han permitido adquirir conocimientos teóricos y prácticos en áreas de resonancia magnética nuclear (RMN), biología estructural, química de carbohidratos y síntesis orgánica. Mi trabajo se ha enfocado fundamentalmente en el análisis estructural de moléculas de relevancia biológica para tratar de tener un mejor entendimiento de sus funciones. Durante mis estudios doctorales en el grupo del Prof. Widmalm (2009-2013) me especialicé en el análisis estructural y conformacional de carbohidratos complejos, así como en el desarrollo de técnicas de RMN para el estudio de los mismos en solución. Durante este período realicé la elucidación estructural del antígeno-O específico seis serogrupos de *E. coli* (Carbohydrate Research, 2015 & 2012; ChemistryOPEN, 2015; Glycobiology, 2014 & 2012; ChemPlusChem, 2013), en su mayoría patógenos, lo que contribuyó a un mejor entendimiento de algunas reacciones serológicas cruzadas observadas con otros serogrupos. Algunos de los datos estructurales fueron usados en combinación con información genética, para predecir las funciones de las glicosiltransferasas involucradas en la biosíntesis del antígeno. De particular importancia fue la caracterización del núcleo de los lipopolisacáridos de varias cepas mutantes de *Brucella melitensis*, que nos permitió identificar un motivo estructural crítico para la virulencia (JBC, 2016). Asimismo, he tenido la oportunidad de contribuir en proyectos multidisciplinarios con otros grupos de investigación europeos y nacionales, en proyectos que involucraron la confirmación estructural de glicopéptidos sintéticos (Nature Chemistry, 2013; JACS, 2012), la caracterización de polisacáridos obtenidos mediante bioingeniería (Molecular Microbiology, 2012), la determinación de patrones de O-acetilación de un antígeno de *Shigella flexneri* como base para la preparación de material sintético a ser usado en vacunas (EurJOC, 2013), y la elucidación estructural de glicanos de la capa laminar de los parásitos *Echinococcus granulosus* y *E. multilocularis* (Int. J. Parasitol, 2016; Biochemistry, 2009). Durante mis estudios doctorales también contribuí al desarrollo de técnicas para el estudio de carbohidratos por espectroscopía de RMN, por ejemplo, mediante mejoras a bases de datos/programas tales como CASPER y ECODAB (Biomacromolecules, 2011; Carbohydrate Research, 2013; Glycobiology, 2014), así como también por medio de la identificación/optimización de técnicas de RMN para el estudio de carbohidratos enriquecidos uniformemente en carbono-13 (Biomol. NMR, 2014). Más allá de la estructura química, también me he enfocado en el estudio de las preferencias conformacionales de polisacáridos bacterianos (Biomacromolecules, 2013, entre otros trabajos a ser publicados), así como también en estudios de la dinámica conformacional de RNAs no codificantes (instancia postdoctoral 2014-2015 en el grupo de la Dra. Petzold, mediante el empleo de técnicas de RMN de dispersión de relajación de espines de <sup>13</sup>C y <sup>15</sup>N (póster en SBNet, 2015). A fines del año 2015 me integré al grupo docente del Departamento de Química del Litoral (CENUR LN), como Profesor Adjunto (efectivo) de la Facultad de Química. En este momento se está trabajando en líneas de investigación relacionadas con el estudio de polisacáridos bacterianos, con potencial aplicación en el desarrollo de vacunas y métodos de diagnóstico (proyectos CSIC I+D 1503 y Fondo María Viñas FMV\_1\_2017\_1\_135751)

## Producción bibliográfica

### ARTÍCULOS PUBLICADOS

#### ARBITRADOS

##### **Dye sensitized solar cells based on Antarctic Hymenobacter sp. UV11 dyes (Completo, 2018)**

Tatiana Montagni , Paula Enciso , Juan José Marizcurrena , Susana Castro-Sowinski , Carolina Fontana , Danilo Davyt , María Fernanda Cerdá  
Environmental Sustainability, v.: 1 1 , p.:89 - 97, 2018  
Palabras clave: Hymenobacter sp Antártida xantófilas  
Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 2523-8922

DOI: [10.1007/s42398-018-0007-1](https://doi.org/10.1007/s42398-018-0007-1)

<https://doi.org/10.1007/s42398-018-0007-1>

##### **Structural Studies of Lipopolysaccharide Defective Mutants from *Brucella melitensis* Identify a Core Oligosaccharide Critical in Virulence (Completo, 2016)**

Carolina Fontana , RAQUEL CONDE-ÁLVAREZ , JONAS STÄHLE , OTTO HOLST , MAITE IRIARTE , YUN ZHAO , VILMA ARCE-GORVEL , SEÁN HANNIFFY , JEAN-PIERRE GORVEL , IGNACIO MORIYÓN , GÖRAN WIDMALM

Journal of Biological Chemistry, v.: 291 p.:7727 - 7741, 2016

Palabras clave: Resonancia Magnética Nuclear glicosiltransferasa lipopolisacárido *Brucella melitensis*



Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética

Nuclear

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00219258

DOI: [10.1074/jbc.M115.701540](https://doi.org/10.1074/jbc.M115.701540)

<http://www.jbc.org/content/early/2016/02/11/jbc.M115.701540.abstract>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Negligible elongation of mucin glycans with Gal  $\beta$ 1-3 units distinguishes the laminated layer of *Echinococcus multilocularis* from that of *Echinococcus granulosus* (Completo, 2016)**

LUCIA DEL PUERTO, ROMINA ROVETTA, MARCO NAVATTA, Carolina Fontana, GERARDO LIN, GUILLERMO MOYNA, SYLVIA DEMATTEIS, KLAUS BREHM, URIEL KOZIOL, FERREIRA, F., A. DIAZ

International Journal for Parasitology, v.: 46 p.:311 - 321, 2016

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00207519

DOI: [10.1016/j.ijpara.2015.12.009](https://doi.org/10.1016/j.ijpara.2015.12.009)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020751916000370>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Structural studies of a polysaccharide from *Vibrio parahaemolyticus* strain AN-16000 (Completo, 2016)**

Carolina Fontana, MONA ZACCHEUS, ANDREJ WEINTRAUB, MOHAMMAD

ANSARUZZAMAN, GÖRAN WIDMALM

Carbohydrate Research, v.: 432 p.:1 - 9, 2016

Palabras clave: polisacárido *Vibrio parahaemolyticus* glicerol-1-fosfato

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00086215

DOI: [10.1016/j.carres.2016.06.004](https://doi.org/10.1016/j.carres.2016.06.004)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0008621516302038>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Structural studies and biosynthetic aspects of the O-antigen polysaccharide from *Escherichia coli* O42 (Completo, 2015)**

Carolina Fontana, ANDREJ WEINTRAUB, GÖRAN WIDMALM

Carbohydrate Research, v.: 403 p.:174 - 181, 2015

Palabras clave: Resonancia Magnética Nuclear *Escherichia coli* elucidación estructural

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

Medio de divulgación: Internet

Escrito por invitación

ISSN: 00086215

DOI: [10.1016/j.carres.2014.05.003](https://doi.org/10.1016/j.carres.2014.05.003)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0008621514001955>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Structural studies of the exopolysaccharide from *Lactobacillus plantarum* C88 using NMR spectroscopy and the program CASPER (Completo, 2015)**

Carolina Fontana, SHENGYU LI, ZHENNAI YANG, GÖRAN WIDMALM

Carbohydrate Research, v.: 402 p.:87 - 94, 2015

Palabras clave: Resonancia Magnética Nuclear exopolisacárido *Lactobacillus plantarum*

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00086215

DOI: [10.1016/j.carres.2014.09.003](https://doi.org/10.1016/j.carres.2014.09.003)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0008621514003486>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **Structural Elucidation of the O-Antigen Polysaccharide from Escherichia coli O181 (Completo, 2015)**

Carolina Fontana, ANDREJ WEINTRAUB, GÖRAN WIDMALM

ChemsitryOPEN, v.: 4 p.:47 - 55, 2015

Palabras clave: Resonancia Magnética Nuclear Escherichia coli elucidación estructuralpolisacárido

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 21911363

DOI: [10.1002/open.201402068](https://doi.org/10.1002/open.201402068)

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/open.201402068/abstract>

WEB OF SCIENCE™

#### **Discrimination of epimeric glycans and glycopeptides using IM-MS and its potential for carbohydrate sequencing (Completo, 2014)**

PETER BOTH, ANTHONY GREEN, CHRISTOPHER GRAY, ROBERT ARDŽÍK, JOSEPH VOGLMEIR, Carolina Fontana, MARTINA AUSTERI, MARTIN REJZEK, DOMINIQUE RICHARDSON, ROB FIELD, GÖRAN WIDMALM, SABINE FLITSCH

Nature Chemistry, v.: 6 p.:65 - 74, 2014

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

ISSN: 17554330

DOI: [10.1038/nchem.1817](https://doi.org/10.1038/nchem.1817)

<http://www.nature.com/nchem/journal/v6/n1/full/nchem.1817.html>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **Rapid structural elucidation of polysaccharides employing predicted functions of glycosyltransferases and NMR data: application to the O-antigen of Escherichia coli O59 (Completo, 2014)**

Carolina Fontana, MAGNUS LUNDBORG, ANDREJ WEINTRAUB, GÖRAN WIDMALM

Glycobiology, v.: 24 p.:450 - 457, 2014

Palabras clave: RMN Escherichia coli glicosiltransferasas ECODAB

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

ISSN: 09596658

DOI: [10.1093/glycob/cwu011](https://doi.org/10.1093/glycob/cwu011)

<http://glycob.oxfordjournals.org/content/24/5/450>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **NMR structure analysis of uniformly 13C-labeled carbohydrates (Completo, 2014)**

Carolina Fontana, HELENA KOVACS, GÖRAN WIDMALM

Journal of Biomolecular NMR, v.: 59 2, p.:95 - 110, 2014

Palabras clave: Resonancia Magnética Nuclear Carbohidratos elucidación estructural

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Espectroscopía

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

Medio de divulgación: Papel

Escrito por invitación

ISSN: 15735001

DOI: [10.1007/s10858-014-9830-6](https://doi.org/10.1007/s10858-014-9830-6)

<http://link.springer.com/article/10.1007/s10858-014-9830-6>

**Glycoengineering of host mimicking type-2 LacNAc polymers and Lewis X antigens on bacterial cell surfaces. (Completo, 2013)**

MANUELA MALLY , Carolina Fontana , SALOMÉ LEIBUNDGUT-LANDMANN , LAMIA LAACISSE , YAO-YUN FAN , GÖRAN WIDMARM , MARKUS AEBI

Molecular Microbiology, v.: 87 p.:121 - 131, 2013

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Resonancia Magnética Nuclear

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 0950382X

DOI: [10.1111/mmi.12086](https://doi.org/10.1111/mmi.12086)

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/mmi.12086/abstract>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Facile Structural Elucidation of Glycans Using NMR Spectroscopy Data and the Program CASPER: Application to the O-Antigen Polysaccharide of Escherichia coli O155 (Completo, 2013)**

Carolina Fontana , ANDREJ WEINTRAUB , GÖRAN WIDMARM

ChemPlusChem, 2013

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Resonancia Magnética Nuclear

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 21926506

DOI: [10.1002/cplu.201300273](https://doi.org/10.1002/cplu.201300273)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Structural studies of the O-acetyl containing O-antigen from a Shigella flexneri serotype 6 strain and synthesis of oligosaccharide fragments thereof (Completo, 2013)**

PIERRE CHASSAGNE , Carolina Fontana , CATHERINE GUERREIRO , CHARLES GAUTHIER , ARMELLE PHALIPON , GÖRAN WIDMARM , LAURENCE A. MULARD

European Journal of Organic Chemistry, v.: 19 p.:4085 - 4106, 2013

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Resonancia Magnética Nuclear

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 1434193X

DOI: [10.1002/ejoc.201300180](https://doi.org/10.1002/ejoc.201300180)

<http://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1002/ejoc.201300180/abstract>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Structural studies of the O-antigen polysaccharide from Escherichia coli O115 and biosynthetic aspects thereof (Completo, 2013)**

Carolina Fontana , KRISTOFFER RAMSTRÖM , ANDREJ WEINTRAUB , GÖRAN WIDMARM

Glycobiology, v.: 23 p.:354 - 362, 2013

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Resonancia Magnética Nuclear

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 09596658

DOI: [10.1093/glycob/cws161](https://doi.org/10.1093/glycob/cws161)

<http://glycob.oxfordjournals.org/content/23/3/354.abstract>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Conformational preferences of the O-antigen polysaccharides of Escherichia coli O5ac and O5ab using NMR spectroscopy and molecular modelling (Completo, 2013)**

ANITA SARKAR, Carolina Fontana, ANNE IMBERTY, SERGE PÉREZ, GÖRAN WIDMALM  
Biomacromolecules, v.: 14 p.:4085 - 4106, 2013

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Resonancia Magnética Nuclear

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 15257797

DOI: [10.1021/bm400354y](https://doi.org/10.1021/bm400354y)

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/bm400354y>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Complete 1H and 13C NMR chemical shift assignments of mono- to tetrasaccharides as basis for NMR chemical shift predictions of oligosaccharides using the computer program CASPER (Completo, 2013)**

JERK RÖNNOLS, ROBERT PENDRILL, Carolina Fontana, CHRISTOFFER HAMARK, THIBAUT ANGLES DORTOLI, OLOF ENGSTRÖM, JONAS STÅHLE, MONA V. ZACCHEUS, ELIN SÄWÉN, LILJAN E. HAHN, SHAHZAD IQBAL, GÖRAN WIDMALM

Carbohydrate Research, 2013

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Resonancia Magnética Nuclear

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00086215

DOI: [10.1016/j.carres.2013.06.026](https://doi.org/10.1016/j.carres.2013.06.026),

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0008621513002590>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Chemoenzymatic Synthesis of O-Mannosylpeptides in Solution and on Solid Phase (Completo, 2012)**

ROBERT ARDŽÍK, ANTHONY P. GREEN, NICOLAS LAURENT, PETER BOTH, Carolina Fontana, JOSEF VOGLMEIR, MARTIN J. WEISSENBORN, ROSE HADDOUB, PAOLA GRASSI, STUART M. HASLAM, GÖRAN WIDMALM, SABINE L. FLITSCH

Journal of the American Chemical Society, 2012

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Resonancia Magnética Nuclear

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00027863

DOI: [10.1021/ja211861m](https://doi.org/10.1021/ja211861m)

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ja211861m>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Structural studies and biosynthetic aspects of the O-antigen polysaccharide from Escherichia coli O174 (Completo, 2012)**

Carolina Fontana, MAGNUS LUNDBORG, ANDREJ WEINTRAUB, GÖRAN WIDMALM  
Carbohydrate Research, 2012

Palabras clave: Resonancia Magnética Nuclear

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Resonancia Magnética Nuclear

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 00086215

DOI: [10.1016/j.carres.2012.02.020](https://doi.org/10.1016/j.carres.2012.02.020)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0008621512000833?v=s5>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Automatic structure determination of regular polysaccharides based solely on NMR spectroscopy (Completo, 2011)**

MAGNUS LUNDBORG, Carolina Fontana, GÖRAN WIDMALM

Biomacromolecules, v.: 12 11, p.:3851 - 3855, 2011

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y glicoconjugados

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Resonancia Magnética Nuclear

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 15257797

DOI: [10.1021/bm201169y](https://doi.org/10.1021/bm201169y)

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/bm201169y>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Insights into the stereoselective BF<sub>3</sub>-catalyzed hetero DielsAlder reaction of Garner's aldehyde with Danishefsky's diene (Completo, 2010)**

Carolina Fontana, MARCELO INCERTI, GUILLERMO MOYNA, EDUARDO MANTA

Tetrahedron-Asymmetry, v.: 21 p.:398 - 404, 2010

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica / Resonancia Magnética Nuclear

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

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 09574166

DOI: [10.1016/j.tetasy.2010.02.028](https://doi.org/10.1016/j.tetasy.2010.02.028)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0957416610001606>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**The major surface carbohydrates of the Echinococcus granulosus cyst: mucin-type O-glycans decorated by novel galactose-based structures (Completo, 2009)**

A. DIAZ, Carolina Fontana, ADRIANE R. TODESCHINI, SOULIĆIĆ, S., HUMBERTO GONZÁLEZ, CASARAVILLA, C., MAGDALENA PORTELA, LUCIA MENDONÇA-PREVIATO, JOSE O. PREVIATO, FERREIRA, F.

Biochemistry, 2009

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00062960

[www.pubs.acs.org](http://www.pubs.acs.org)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**A facile synthesis of cycloether systems bearing [2,4]-oxazole units (Completo, 2008)**

INCERTI M, Carolina Fontana, LAURA SCARONE, GUILLERMO MOYNA, EDUARDO MANTA

Heterocycles, v.: 75 6, p.:1385 - 1396, 2008

Palabras clave: oxazole Phorboxazoles

Areas de conocimiento:

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

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Japon

ISSN: 03855414

<http://data.heterocycles.jp/>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Conformational Analysis of Analogs of the Bis-Oxazole Oxane Fragment of the Phorboxazoles by NMR Spectroscopy and Molecular Modeling Simulations (Completo, 2008)**

Carolina Fontana, MARCELO INCERTI, GUILLERMO MOYNA, EDUARDO MANTA

Magnetic Resonance in Chemistry, v.: 46 p.:36 - 41, 2008

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis Orgánica  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Modelado Molecular  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 07491581

<http://www3.interscience.wiley.com/journal/117935720/grouphome/home.html>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

#### **Characterisation of myo-inositol hexakisphosphate deposits from larval *Echinococcus granulosus* (Completo, 2006)**

CASARAVILLA, C., BREARLEY, C.E., SOULÉ, S., Carolina Fontana, VEIGA, N., MARÍA INÉS BESSIO., FERREIRA, F., KREMER, C., DÍAZ, A

FEBS Journal (The), v.: 273 p.:3192 - 3203, 2006

Palabras clave: Echinococcus phytic acid inositol hexakisphosphate inositol pentakisphosphate

Areas de conocimiento:

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 1742464X

<http://www.febsjournal.org/>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

## Producción técnica

### PROCESOS

#### **Determinación de la relación de amilosa/amilopectina en harinas de granos empleando líquidos iónicos y 13C RMN (2008)**

Técnica Analítica

ADRIANA GARCÍA, Carolina Fontana, GUILLERMO MOYNA, PATRICK MOYNA

implementación de una metodología rápida para la determinación de la relación de amilosa/amilopectina en harinas de granos, empleando 13C RMN y disolución de los mismos en líquidos iónicos

País: Uruguay

Disponibilidad: Restricta

Institución financiadora: DEPTEQ, Facultad de Química, UdelaR

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

Medio de divulgación: Otros

### TRABAJOS TÉCNICOS

#### **Determinación del Peso Molecular Promedio de Heparinas de Bajo Peso Molecular del Mercado Uruguayo Empleando 13C RMN (2005)**

Asesoramiento

Carolina Fontana, H. PEZAROGLO, EDUARDO MANTA

implementación de una metodología rápida para la determinación del Peso Molecular promedio de Heparinas de Bajo Peso Molecular

País: Uruguay

Idioma: Español

Ciudad: Montevideo

Número de páginas: 14

Duración: 2 meses

Institución financiadora: convenio Facultad de Química con el Sector Productivo Nacional

Palabras clave: 13C RMN heparinas de bajo peso molecular DEPT

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

Medio de divulgación: Papel

Los resultados de este trabajo fueron presentados en forma de póster en la I Reunión Latinoamericana de Química Medicinal, 2007, pp 45 del libro de resúmenes.

## Otras Producciones

## INFORMES DE INVESTIGACIÓN

### **Informe Final del Proyecto: Desarrollo de potenciales fármacos antihelmínticos, basado en simplificaciones funcionales y topológicas de productos naturales bioactivos de origen marino (FCE 10050) (2008)**

Carolina Fontana, MARCELO INCERTI, EDUARDO MANTA

País: Uruguay

Idioma: Español

Medio divulgación: Papel

Nombre del proyecto: Desarrollo de potenciales fármacos antihelmínticos, basado en simplificaciones funcionales y topológicas de productos naturales bioactivos de origen marino (FCE 10050)

Número de páginas: 69

Disponibilidad: Restringida

Institución Promotora/Financiadora: FCE 10050

Palabras clave: hetero Diels-Alder Phorboxazoles RMN antihelmíntico estudios conformacionales aldehído de Garner

Áreas de conocimiento:

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

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética

Nuclear

### **Informe de Avance de la Tesis de Maestría (Evaluado por el Asesor Externo Dr. Gerardo Burton, UBA, Argentina) (2008)**

Carolina Fontana

País: Uruguay

Idioma: Español

Medio divulgación: Papel

Nombre del proyecto: Estudios Sintéticos, Estructurales y Biológicos de Análogos Funcional y Topológicamente Simplificados de Metabolitos Marinos Activos

Número de páginas: 93

Institución Promotora/Financiadora: Facultad de Química / PEDECIBA Química / ANII (becas de posgrado)

Palabras clave: hetero Diels-Alder Phorboxazoles RMN estudios conformacionales simulated annealing

Áreas de conocimiento:

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética

Nuclear

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

### **1er Informe de Avance del Proyecto: Desarrollo de potenciales fármacos antihelmínticos, basado en simplificaciones funcionales y topológicas de productos naturales bioactivos de origen marino (FCE 10050) (2006)**

Carolina Fontana, MARCELO INCERTI, EDUARDO MANTA

País: Uruguay

Idioma: Español

Medio divulgación: Papel

Nombre del proyecto: Desarrollo de potenciales fármacos antihelmínticos, basado en simplificaciones funcionales y topológicas de productos naturales bioactivos de origen marino (FCE 10050)

Número de páginas: 32

Disponibilidad: Restringida

Institución Promotora/Financiadora: FCE 10050

Palabras clave: hetero Diels-Alder Phorboxazoles antihelmíntico ciclación de Prins

Áreas de conocimiento:

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

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética

Nuclear

## Evaluaciones

## EVALUACIÓN DE PROYECTOS

### EVALUACIÓN INDEPENDIENTE DE PROYECTOS

#### Programa Iniciación a la Investigación de CSIC ( 2017 )

Uruguay

CSIC

Cantidad: Menos de 5

Evaluador externo de un proyecto para el programa Programa Iniciación a la Investigación convocatoria 2017 de CSIC

## EVALUACIÓN DE PUBLICACIONES

### REVISIONES

#### International Journal of Spectroscopy ( 2015 )

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

## EVALUACIÓN DE CONVOCATORIAS CONCURSABLES

#### Llamado a aspirantes para la formación de un cuadro de interinatos, a cargos de Asistentes para el Departamento de Química del Litoral ( 2018 )

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Llamado a aspirantes para la formación de un cuadro de interinatos, a cargos de Asistentes para el Departamento de Química del Litoral (Esc. G, Gr. 2), Facultad de Química, Universidad de la República, 2018 (llamado N° 103/2018, exp. N° 101120-001146-18)

#### Llamado a aspirantes para la provisión efectiva de un cargo de Asistente para el Depto. de Química del Litoral ( 2018 )

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Universidad de la República

Integrante de la comisión asesora que entendió en el llamado a Concurso Abierto de Méritos y Pruebas para la provisión efectiva de un cargo de Asistente del Laboratorio de Espectroscopía y Físicoquímica Orgánica del Depto. de Química del Litoral (Esc. G, Grado 2, 40 hs. sem.), con cargo a fondos provenientes de la carrera financiada por CCI, "CUP: 13. Química. Orientación Agrícola y Medioambiental", Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay, 2017 (Exp. No 101120-001226-18).

#### Llamado a aspirantes para la provisión interina de un cargo de Asistente para el Depto. de Química Orgánica ( 2017 )

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Facultad de Química

Integrante de la comisión asesora que entendió en el llamado a aspirantes para la provisión interina de un cargo de Asistente para el Depto. de Química Orgánica (Esc. G, Grado 2, 20 hs. sem.), a partir de la toma de posesión (no antes del 01/04/17) y hasta el 30/06/17 (con posibilidad de renovación), con cargo a fondos del proyecto CSIC I+D Llamado 2016 (Resp. C. Fontana, llave presupuestal 1010410200).

#### Llamado a aspirantes para la provisión efectiva de un cargo de Asistente para el Depto. de Química del Litoral ( 2017 )

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Integrante de la comisión asesora que entendió en el llamado a concurso abierto de méritos y pruebas para la provisión efectiva de un cargo de Asistente para el Laboratorio de Espectroscopía y Físicoquímica Orgánica del Depto. de Química del Litoral (Esc. G, Grado 2, 40 hs. sem.), Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay, 2017 (Exp. No 101120-001379-17).



**Llamado a aspirantes para la provisión interina de un cargo de Asistente para el Laboratorio de Carbohidratos y Glicoconjugados - DQO ( 2017 )**

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Facultad de Química

Llamado a aspirantes para la provisión interina de un cargo de Asistente para el Laboratorio de Carbohidratos y Glicoconjugados - DQO (Esc. G, Grado 2, 20 hs. sem.), con cargo a fondos de proyecto INIA (Resp. F. Ferreira, llave presupuestal 1082922117), Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay, 2017 (Exp. No 101120-001432-17).

**Llamado a aspirantes para la formación de un cuadro de interinatos, a cargos de Ayudantes para el Departamento de Química del Litoral ( 2017 )**

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: De 5 a 20

Facultad de Química

Llamado a aspirantes para la formación de un cuadro de interinatos, a cargos de Ayudantes para el Departamento de Química del Litoral (Esc. G, Gr. 1), Facultad de Química, Universidad de la República, 2017 (llamado No 119/17, Exp. No 101120-001328-17).

**Llamado a aspirantes para la provisión interina de dos cargos de Ayudante del Depto. de Química del Litoral - Centro Universitario Paysandú ( 2016 )**

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Departamento de Química del Litoral, Facultad de Química

Llamado a aspirantes para la provisión interina de dos cargos de Ayudante del Depto. de Química del Litoral - Centro Universitario Paysandú (Esc. G, Grados 1, 30 hs. sem.), a partir de la toma de posesión y hasta el 31/12/16 (con posibilidad de renovación), con cargo a fondos presupuestales de Paysandú (llave presupuestal 1001310501). (Exp. N° 101120-002097-16)

**Llamado a aspirantes para la formación de un Cuadro de Interinatos de Asistentes para el Departamento de Química del Litoral ( 2016 )**

Comité evaluador

Uruguay

Cantidad: Menos de 5

Departamento de Química del Litoral, Facultad de Química

Llamado a aspirantes N° 127/16, para la formación de un cuadro de interinatos a cargos de Asistente para el Departamento de Química del Litoral (Esc. G, Gr. 2), Convocatoria 2016. (Exp. N° 101120-001403-16)

## Formación de RRHH

### TUTORÍAS CONCLUIDAS

#### GRADO

**Glycomics Related to Microarray Analysis and Structural Elucidation of Bacterial Polysaccharides by NMR Spectroscopy (2012)**

Tesis/Monografía de grado

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Stockholms Universitet , Suecia

Programa: Master Thesis

Nombre del orientado: Kristoffer Ramström

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Suecia, Inglés

Áreas de conocimiento:

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

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

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

Supervisora de la tesis de maestría del estudiante Kristoffer Ramström (Supervisor principal Prof.

Göran Widmalm, Departamento de Química Orgánica, Universidad de Estocolmo, Suecia).

#### **Caracterización molecular del polisacárido de la cápsula aniónica del *Streptococcus pneumoniae* Serotipo 14 (2008)**

Tesis/Monografía de grado

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

Programa: Química

Nombre del orientado: Humberto Gonzalez

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Áreas de conocimiento:

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biología Celular, Microbiología

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

Co-tutora de la tesina de grado del Bach. Humberto González (bajo la supervisión del Dr. Fernando Ferreira) que involucra la caracterización molecular del polisacárido de la cápsula aniónica del *Streptococcus pneumoniae* Serotipo 14. Laboratorio de Carbohidratos y Glicoconjugados, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República.

### **TUTORÍAS EN MARCHA**

#### **POSGRADO**

##### **Antígenos Polisacáridicos Nativos y Modificados: Obtención y Caracterización Química y Físicoquímica (2016)**

Tesis de doctorado

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

Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: María Inés Bessio

País/Idioma: Uruguay, Español

Tesis de posgrado co-dirigida con el Prof. Fernando Ferreira. Defensa intermedia para salto a tesis de doctorado prevista para marzo de 2018.

### **Otros datos relevantes**

#### **PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS**

##### **Beneficiaria de Fondos de Inserción de Científicos del PEDECIBA 2015 (2015)**

(Nacional)

PEDECIBA

Apoyo de \$ 150.000 para gastos de instalación a científicos que arriban al país para ocupar cargos académicos

##### **Investigador Nivel I (2015)**

(Nacional)

Sistema Nacional de Investigadores (SNI)

##### **Investigador Grado 3 (2015)**

(Nacional)

PEDECIBA Química

##### **Beca para asistir a congresos (2013)**

(Internacional)

C.F. Liljevalch J:ors foundation - Suecia

Beca de 6.000 SEK (aprox. 900 dólares) para asistir al congreso Euromar 2013 llevado a cabo en Hersonissos, Grecia.

##### **Beca para asistir a congresos (2013)**

(Internacional)

Ångpanneföreningens research foundation - Suecia

Beca de 12.000 SEK (aprox. U\$S 1800 ) para asistir al 54to ENC llevado a cabo en Pacific Grove, CA, USA.

**Beca para asistir a congresos (2011)**

(Internacional)

K. & A. Wallenberg foundation - Suecia

Beca de 11.000 SEK (aprox. U\$S 1650 ) para asistir al 52do ENC, llevado a cabo en Pacific Grove, CA, USA.

**Beca para asistir a congresos (2011)**

(Internacional)

Suraj P. Manrao Science foundation

Beca de U\$S 450 para asistir al 52do ENC, llevado a cabo en Pacific Grove, CA, USA.

**Beca para asistir a congresos (2010)**

(Internacional)

Comité organizador del 4th BMMC

Beca de 300 para asistir al 4to Baltic Meeting on Microbial Carbohydrates, llevado a cabo en Hyttiälä Forestry Field Station, Finlandia entre el 19-22 de Setiembre 2010.

**Early Stage Researcher Marie Curie Fellowship (2009)**

(Internacional)

European Commissions Seventh Framework Programme FP7/2007-2013

Beca de posgrado (3 años) dentro del proyecto de cooperación EuroGlycoArrays.

**Beca de Posgrado (2008)**

(Nacional)

ANII

Beca de Maestría (01/2008-07/2009)

**Beca de Posgrado (2007)**

(Nacional)

PEDECIBA Química

Beca de Maestría (03/2007-06/2007)

**Beca de Posgrado (2007)**

(Nacional)

Facultad de Química, UDELAR

Beca de Maestría (07/2007-12/2007)

**Beca para realización de una pasantía en la University of the Sciences in Philadelphia, Philadelphia, PA, USA (2007)**

(Nacional)

PEDECIBA Química

**Mención especial del poster Estudios sintéticos del fragmento bis-oxano oxazol C3-C19 del Phorboxazol (2005)**

(Nacional)

V Reunión de la Sociedad Latinoamericana de Fitoquímica

**Beca para asistir a congresos (2005)**

(Internacional)

OEA y AECI

Pasajes y Alojamiento para asistir a las Jornadas Iberoamericanas de RMN - Avances en RMN e interacciones moleculares llevadas a cabo en Santa Cruz de la Sierra, Bolivia

## PRESENTACIONES EN EVENTOS

### 29th International Carbohydrate Symposium (2018)

Congreso

Fontana, C.; Weintraub, A.; Widmalm, G. Structural Studies and Biosynthetic Aspects of the O-antigen polysaccharide from Shigatoxin-Producing E. coli O179

Portugal

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Facultad de Ciencias de la Universidad de Lisboa

Palabras Clave: Antígeno O-específico Escherichia coli RMN

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Carbohidratos y Glicoconjugados

### BIOTEC 2017 (2017)

Congreso

Porciúncula González, C.; Fontana, C.; Saenz-Méndez, P.; Giacomini, C.\*; Irazoqui, G. Uso de beta-galactosidasa como herramienta biotecnológica para la generación de galactósidos con potencial actividad como inhibidores de galectinas.

España

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 1

El trabajo fue presentado por la Dra. Gabriela Irazoqui.

### Expofarma (2017)

Congreso

Fontana, C.\* La Resonancia Magnética Nuclear Como Herramienta Para el Aseguramiento de la Calidad de Productos Biológicos y Biofármacos

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 1

Nombre de la institución promotora: Revista Indufarma

### ENAIQU5 (2017)

Congreso

Fontana, C.\*; Bessio, M. I.; Catalán, A. I.; Ferreira, F. Caracterización de la unidad biológica repetitiva y largo de cadena del PS-C de S. pneumoniae por espectroscopía de RMN

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 1

Nombre de la institución promotora: PEDECIBA QUIMICA

El Streptococcus pneumoniae es un importante patógeno, que se asocia con la mayoría de los casos de neumonía a nivel mundial. Alrededor de 1.5 millones de personas mueren al año a causa de este patógeno, siendo más de la mitad niños menores de 5 años. Los polisacáridos capsulares (CPS) de estas bacterias son considerados factores de virulencia importantes asociados a cepas patogénicas, y se usan para definir los diferentes serotipos. Además, las cepas de S. pneumoniae despliegan en su superficie un polisacárido (PS) específico de la especie conocido como polisacárido C (PS-C). Desde hace ya bastante tiempo, se sabe que el PS-C está unido covalentemente a la pared de peptidoglicano (PG), pero la descripción química detallada de esta unión aún no es clara. Los procesos de obtención del PS-C y/o CPS se basan en la lisis del PG utilizando enzimas específicas y, dependiendo de la eficiencia de estos procesos, se pueden llegar a obtener fragmentos de PG de tamaño significativo, que tienen unidas más de una cadena de PS. Por esta razón, el PS-C resulta ser un contaminante habitual de las preparaciones de CPS empleados en vacunas. A nuestro entender, un conocimiento detallado de la unión del PS-C al PG permitiría diseñar métodos de aislamiento más específicos, con el fin de obtener CPS más puros y, también, revelar aspectos claves en la biosíntesis del PS-C. Recientemente nos hemos enfocado en el estudio de una muestra comercial de este PS, con el fin de identificar la unidad biológica repetitiva y el largo de cadena del mismo, usando espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear (RMN). Este análisis se centra en la identificación de las señales del monosacárido ubicado en el extremo no-reductor del PS-C, que nos ha permitido confirmar la estructura de la unidad biológica repetitiva del mismo. A partir de la intensidad de la señal del protón anomérico del residuo ubicado en el extremo no reductor del PS, fue posible determinar que el PS-C está compuesto de 7 unidades repetitivas (internas) en promedio por cada unidad terminal, y por ende tiene un peso molecular promedio de ~ 9 kDa. A pesar de que este valor es un poco menor a lo reportado en bibliografía (22 kDa) las diferencias

pueden atribuirse a que se tratan de diferentes preparaciones, y/o al hecho de que el método de electroforesis se ve afectado por la solvatación de la molécula, mientras que el método de integración de las señales del espectro de  $^1\text{H}$  RMN refleja un largo de cadena más real. Más allá de esto, un estudio que hemos llevado a cabo recientemente por cromatografía de exclusión por tamaño, revela que la estructura molecular de la preparación comercial presenta un peso molecular significativamente más alto (entre 200-400 kDa), indicando que los fragmentos de PG ubicados en el extremo reductor tendrían un tamaño considerable, y/o habría otras cadenas de PS-C unidas al mismo fragmento de PG.

#### **ENAIQUIS (2017)**

Congreso

Peña, S.\*; Scarone, L.; Stewart, L.; Yardley, V.; Fontana, C.; Moyna, G.; Serra, G. En la búsqueda del mecanismo de acción de macrociclos con potencial actividad anti-malárica

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 1

Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Química

El trabajo fue presentado por la Dra. S. Peña

#### **I&S WORKSHOP. Insights and strategies towards a bio-based economy (2016)**

Congreso

Wallace, F.\*; Bennadji, Z.; Fontana, C.; Bessio, M.I.; Ferreira F.; Olivaro C. QS-21: A highly valuable biotechnological product can be obtained in a sustainable form from *Q. brasiliensis*, a native tree from Uruguay

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 1

El trabajo fue presentado por el Q.F. Federico Wallace.

#### **Integrative methods in Structural Biology to enhance high impact research in health and disease (2016)**

Congreso

Fontana, C.\*; Widmalm, G. Structural Analysis of Bacterial Polysaccharides Using NMR Data, the Program CASPER and Predicted Functions of Glycosyltransferases

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 1

Nombre de la institución promotora: Instituto Pasteur Montevideo

Glycans are one of the most abundant biomolecules found in all living cells, and they can be attached to other molecules, such as lipids or proteins, to form glycoconjugates. The O-antigen polysaccharide (PS) is the outermost part of the lipopolysaccharide (LPS), and it is considered an important virulence factor that confer protection to gram-negative bacteria. Since these moieties are exposed to the surface of the cell, they are targets for host antibodies, and the knowledge of their structures is important for the development of new diagnostic and therapeutic strategies. The complexity of carbohydrates is evidenced by the large number of structures that can be generated with just a few monomers, and it become even more complex in the case of bacterial PS, for which more than a hundred different monosaccharide building blocks have been reported (with just ten of them constituting the mammalian glycome). NMR spectroscopy is one of the most powerful tools to address all the questions required for the characterization of PS, but the limited spectral dispersion of the  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR resonances can make the NMR chemical shift assignment process tedious and time consuming. The program CASPER (<http://www.casper.org.su.se/casper/>) is a promising tool to help to overcome this problem, since the whole analysis of the NMR data can be carried out in an automated or semi-automated manner. The software uses liquid state NMR data to elucidate the structure of glycans based on their  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  chemical shifts, as well as  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  or  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  correlations from 2D experiments. We have recently proved that CASPER is capable of elucidate the structure of a regular polysaccharide of previously unknown structure (the O-antigen PS of *E. coli* O155) in just a few seconds, using solely unassigned NMR data as input information. This was only possible after the development of a new methodology for determination of the absolute configuration of monosaccharides using also NMR spectroscopy. Thus, what is considered the most tedious and time-consuming part of the structural elucidation process of carbohydrates (the assignment of  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR resonances), can be considerably reduced from several hours of manual interpretation (or even days, depending of the complexity of the system and the experience of the interpreter) to a few minutes of automated or semi-automated analysis. Another feature of carbohydrates is that their polymeric structures are not encoded in a template, and the assembly of the PS is mediated by concerted action of a set of specific glycosyltransferases (GTs). We have recently proposed a methodology that utilizes genetic information of glycosyltransferases (GTs) in order to speed up the process carried out by CASPER. Then, the analysis is performed by the

software using unassigned NMR data and the predicted functions of the GTs encoded in the O-antigen gene cluster of the bacteria (which is available in the E. coli O-antigen database, ECODAB). We successfully validate this methodology in the structural elucidation of a PS of a previously unknown structure (the O-specific chain of E. coli O59). The advantage of this methodology is that the sugar analysis and absolute configuration determination of the components is not required and, in some cases, the full automated analysis can be carried out in just a few seconds/minutes using data from a single  $^1\text{H},^{13}\text{C}$ -HSQC spectrum of the PS. The different features supported by the program CASPER will be discussed using results from different projects we have been working with.

### III Workshop on Magnetic Resonance NMR and EPR at the Forefront of Research (2016)

Congreso

Fontana, C.\*; Widmalm, G. Structural Analysis of Bacterial Polysaccharides Using NMR Data, the Program CASPER and Predicted Functions of Glycosyltransferases

Argentina

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 1

Nombre de la institución promotora: Faculty of Biochemistry and Biological Sciences (FBCB), Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe

The lipopolisaccharide (LPS) is a critical virulence factor that confer protection to gram-negative bacteria, and the knowledge its O-antigen polysaccharide (PS) structure is of particular relevance in the development of new diagnostic and therapeutic strategies. The complexity of carbohydrates is evidenced by the large number of structures that can be generated with just a few monomers, and it become even more complex in the case of bacterial PS, for which more than a hundred different monosaccharide building blocks have been reported (with just ten of them constituting the mammalian glycome). NMR spectroscopy is one of the most powerful tools to address all the questions required for the characterization of PS, but the limited spectral dispersion of their  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR resonances can make the NMR chemical shift assignment process tedious and time consuming. The program CASPER is a promising tool to help to overcome this problem, since the whole analysis of the NMR data can be carried out in an automated or semi-automated manner. The software uses liquid state NMR data to elucidate the structure of glycans based on their  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  chemical shifts, as well as  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  or  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  correlations from 2D experiments. We have recently demonstrated that CASPER can elucidate the structure of a regular PS in just a few seconds, using solely unassigned NMR data as input information. This was only possible after the development of a new methodology for determination of the absolute configuration of monosaccharides using NMR spectroscopy. Thus, what is considered the most tedious and time-consuming part of the structural elucidation process of carbohydrates (the assignment of resonances), can be considerably reduced from several hours of manual interpretation (or even days) to a few minutes of automated analysis. Furthermore, we have recently proposed a methodology that utilizes genetic information of glycosyltransferases to speed up the process carried out by CASPER, and we successfully validate this methodology in the structural elucidation of a PS of a previously unknown structure.<sup>7</sup> The advantage of this methodology is that the sugar analysis and absolute configuration determination of the components is not required. Several features supported by the program CASPER, and its limitations, will be discussed using results from different projects we have been working on.

### 19th Annual Conference of SBNet (2015)

Congreso

Fontana, C.\*; Petzold, K. Towards the Characterization of Transient Structures of Helix-44 of the 16S Ribosomal Subunit by NMR Spectroscopy

Suecia

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 1

Nombre de la institución promotora: Structural Biology Network (Suecia)

Palabras Clave: RMN RNA

Ribosomes are large nucleoproteins complexes involved in the biosynthesis of proteins in all living cells. They consist of two subunits containing one or more ribosomal RNAs (rRNA). The 16S rRNA, found in the small 30S ribosomal subunit of prokaryote cells, is composed of 1542 nucleotides and recent studies indicate that helix 44 (nucleotides 1400-1500) plays a significant role in the translocation of tRNA during the translation process. The aim of this work is the characterization of conformational changes in a construct analogous to the apical loop of helix 44 of E. coli, in order to start understanding the conformational changes that may occur in the respective region of helix 44 during the translation process. For this purpose, we use  $^{15}\text{N}$  and  $^{13}\text{C}$  NMR relaxation dispersion techniques, which have previously proven useful in the characterization of RNA excited states (ESs) that exist in low abundance and during short duration. The NMR experiments were carried out on a double-labeled ( $^{15}\text{N}/^{13}\text{C}$ ) RNA construct composed of 25 nucleotides using a Bruker Avance III 600 MHz spectrometer equipped with a 5 mm QCI CryoProbe ( $^1\text{H}/^{13}\text{C}/^{15}\text{N}/^31\text{P}$ ).

#### **Seminarios del DQO (2014)**

Seminario

Fontana, C. Estudios estructurales y conformacionales de polisacáridos bacterianos por espectroscopía de RMN

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 1

Nombre de la institución promotora: Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, UdelaR

Palabras Clave: RMN Carbohidratos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

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

#### **Internal Lunch Seminar (2014)**

Seminario

Fontana, C.; Petzold, K. NMR assignments of a ribosomal RNA helix H44 construct

Suecia

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 1

Nombre de la institución promotora: Department of Medical Biochemistry and Biophysics

#### **54th ENC (Experimental NMR Conference) (2013)**

Congreso

Fontana, C.; Lundborg, M.; Widmalm, G. Computer assisted structural elucidation of carbohydrates using the program CASPER and NMR data.

Estados Unidos

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 1

Palabras Clave: RMN Carbohidratos CASPER

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

NMR spectroscopy is one of the most powerful tools for the structural elucidation of carbohydrates, but the limited spectral dispersion of both  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  nuclei can make the process of assignments of certain resonances tedious and time consuming. Computer assisted analysis of NMR resonances using the CASPER program may help to overcome this limitation. This program uses liquid state NMR data to elucidate the structure of glycans based on their  $^1\text{H}$  and  $^{13}\text{C}$  chemical shifts as well as  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  or  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  correlations from 2D experiments. Herein we present the features supported by the CASPER program till date, as well as recent improvements and applications.

#### **Euromar 2013 (European Magnetic Resonance Meeting) (2013)**

Congreso

Fontana, C. & Widmalm, G. The program CASPER - A useful tool in the analysis of liquid state NMR data of carbohydrates

Grecia

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 1

#### **International Glycomics Symposium. Increasing the Impact of Glycoscience through New Tools and Technologies. (2012)**

Congreso

Fontana, C.; Sarkar, A.; Pérez, S.; Widmalm, G. Conformational studies of the O-antigen polysaccharide from E. coli O5ac using NMR spectroscopy and molecular modelling

España

Tipo de participación: Expositor oral

Palabras Clave: RMN polisacárido Análisis conformacional antígeno O Escherichia coli O5

Áreas de conocimiento:

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

Within Gramnegative bacteria, the family Enterobacteriaceae comprises some of the most common pathogens usually found in clinical specimens, such as *Escherichia coli* strains. The latter are a member of the human colonic flora and rarely harmful; however, some strains have acquired virulence factors that may cause a variety of infections. Lipopolysaccharides (LPS) are found on the outer leaflet of the outer membrane of the Gramnegative bacteria and their antigenic specificities are determined by unique structural differences in the structure of the Oantigen polysaccharide (PS). Presently 174 serogroups have been identified. The structural elucidation of the Oantigen PS, and their conformational behaviours, are important to understand the role of these glycans in the serological specificity and pathogenesis. In the case of *E. coli* O5, structural studies carried out by NMR allowed the identification of two subtypes among this serotype, which were indiscernible from the serological point of view. The Oantigens of *E. coli* O5ab(2) and O5ac(3) have close structural similarity; their repeating units are made up of tetrasaccharides, the difference being at one glycosidic linkage. In the present study, a combination of NMR and molecular modeling methods were used to elucidate the conformation of the Ospecific PS from *E. coli* O5ac. The NMR study was based on the analysis of intra and interresidue distances using NOE buildup curves. Molecular models of the repeating units and their extension to polysaccharides were obtained, taking into account the entire conformational flexibility as assessed by the force field and genetic algorithm. The agreements between experimentally measured and calculated distances can only be obtained by considering an averaging of several low energy conformations observed in the molecular models.

### 26th International Carbohydrate Symposium (ICS) (2012)

Congreso

Fontana, C.; Lundborg, M.; Widman, G. Absolute configuration of glycans based solely on NMR spectroscopy.

España

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 1

Palabras Clave: RMN Carbohidratos CASPER

Areas de conocimiento:

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

NMR spectroscopy is one of the most powerful techniques for the study of biomolecules in solution and, in the particular case of carbohydrates, most of the structural information can be obtained using this methodology. However, the absolute configuration of the constituent monosaccharide residues of glycans is usually carried out by gas chromatography after derivatization of the hydrolyzed material with a chiral reagent. The interpretation of NMR data and the absolute configuration determination by gas chromatography are usually time-consuming and prone to errors. Optimization of the chromatographic conditions is necessary to get acceptable resolution of the retention times of the different monosaccharide derivatives; and at least one of the enantiomers of each monosaccharide present in the sample has to be available for the preparation of standards. However, NMR spectroscopy can also be employed to determine the absolute configuration of the constituent sugar residues in oligo- and polysaccharides after derivatization of the hydrolyzed material with a chiral reagent, such as (S)-2-methylbutyric anhydride.<sup>1</sup> Likewise, monosaccharides have been used to determine the absolute configuration of 2-butanol,<sup>2</sup> and we recently reported a methodology to determine the absolute configuration of the sugar components of glycans exclusively by NMR spectroscopy of their (+)- and (-)-butyl glycoside derivatives.<sup>3</sup> On the other hand, the program CASPER (<http://www.casper.org.su.se/casper/>) uses liquid state NMR data to elucidate the structure of oligosaccharides and repeating units of polysaccharides based on their <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C chemical shifts, as well as <sup>1</sup>H-<sup>13</sup>C correlations from 2D experiments such as <sup>1</sup>H,<sup>13</sup>C-HSQC or <sup>13</sup>C,<sup>1</sup>H-HETCOR, and coupling constants from the anomeric protons and carbons (<sup>1</sup>J<sub>C1,H1</sub> and <sup>3</sup>J<sub>H1,H2</sub>).<sup>4</sup> Recently, the use of <sup>1</sup>H,<sup>1</sup>H-TOCSY, <sup>1</sup>H,<sup>13</sup>C-H2BC and <sup>1</sup>H,<sup>13</sup>C-HMBC experiments has also been implemented in order to gather information of intra-residue correlations and, from the latter, inter-residue connectivities from heteronuclear three-bond correlations.<sup>5</sup> In addition, a module for the absolute configuration determination has been implemented, allowing the fully automatized analysis of glycans using unassigned NMR data as input information. The main advantage of this approach is that once the reference data is available in the CASPER database, the preparation of the standards is no longer required and only the unknown sample has to be derivatized with one of the enantiomeric forms of 2-butanol. Additional (+)- and (-)-2-butyl glycosides of monosaccharides frequently found in bacterial polysaccharides have been prepared, analyzed and incorporated into the CASPER database to be used as reference. Bacterial O-antigen polysaccharides with increasing structural complexity are being analyzed to further validate this methodology.



#### **Scientific Department Meeting (2012)**

Seminario

Fontana, C.; Sarkar, A.; Pérez, S.; Widmalm, G. Conformational studies of the O-antigen polysaccharide from E. coli O5ac using NMR spectroscopy and molecular modelling

Suecia

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 1

Nombre de la institución promotora: Department of Organic Chemistry, Universidad de Estocolmo

#### **Scientific Department Meeting (2012)**

Seminario

Fontana, C.; Svensson, M.; Weintraub, A.; Widmalm, G.  $^{13}\text{C}$ -based NMR Spectroscopy in the Study of Uniformly Labeled Oligo- and Polysaccharides

Suecia

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 1

Nombre de la institución promotora: Department of Organic Chemistry, Universidad de Estocolmo

#### **52nd ENC (Experimental NMR Conference) (2011)**

Congreso

Fontana, C.; Kovacs, H.; Widmalm, G.  $^{13}\text{C}$ -based NMR spectroscopy in the study of uniformly labeled oligo- and polysaccharides

Estados Unidos

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 1

Palabras Clave: RMN Carbohidratos marcado isotópico en  $^{13}\text{C}$

Áreas de conocimiento:

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

Nuclear

$^{13}\text{C}$ -enriched samples are commonly employed in the NMR spectroscopy of proteins and nucleic acids but only limited use has been made of  $^{13}\text{C}$ -enriched carbohydrates.  $^{13}\text{C}$ -labeling may alleviate the problem of the reduced  $^1\text{H}$  chemical shift distribution often found in these compounds and facilitate the complete NMR analysis through the high chemical shift dispersion of  $^{13}\text{C}$  spins. Consequently, a set of optimized pulse sequences is needed for the structural analysis of  $^{13}\text{C}$ -labeled carbohydrates. In this study we investigated different NMR experiments on two  $^{13}\text{C}$ -enriched carbohydrate models, one compound of low molecular weight and one compound of high molecular weight in order to identify a set of useful NMR experiments for unambiguous assignments of carbohydrate resonances and the determination of inter-residue connectivities.

#### **EuroGlycoArrays Project Meeting, Imperial College, Londres (2011)**

Encuentro

Fontana, C.; Widmalm, G. Polysaccharides on GlycoArrays 2

Inglaterra

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 1

#### **EuroGlycoArrays Project Meeting, Universität für Bodenkultur, Vienna, Austria (2011)**

Encuentro

Polysaccharides on GlycoArrays 3

Austria

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 1

#### **4th Baltic Meeting on Microbial Carbohydrates (BMMC) (2010)**

Congreso

Fontana, C.; Svensson, M.; Weintraub, A.; Widmalm, G. Structural studies of *Vibrio parahaemolyticus* (Vp) AN-1600 lipopolysaccharide by NMR

Finlandia

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 1

Palabras Clave: RMN polisacárido antígeno O Vibrio parahaemolyticus

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética

Nuclearmancia Magnética Nuclear

#### **Summer Course Glycosciences, 11th European Training on Carbohydrates (2010)**

Congreso

Fontana, C.; Svensson, M.; Weintraub, A.; Widmalm, G. Structural studies of Vibrio

parahaemolyticus (Vp) AN-1600 lipopolysaccharide by NMR

Holanda

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 1

Palabras Clave: RMN polisacárido antígeno O Vibrio parahaemolyticus

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética

Nuclear

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

#### **EuroGlycoArrays Project Meeting, Manchester Interdisciplinary Biocentre, Manchester, UK (2010)**

Encuentro

Polysaccharides on Glycoarrays 1

Inglaterra

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 1

#### **Scientific Department Meeting (2010)**

Seminario

Fontana, C.; Widmalm, G. Polysaccharides on GlycoArrays

Suecia

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 1

Nombre de la institución promotora: Department of Organic Chemistry, Universidad de Estocolmo

#### **EuroGlycoArrays Project Meeting (2009)**

Encuentro

Fontana, C.; Widmalm, G. Preparation of oligosaccharide material for microarrays and structural studies by NMR

Alemania

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 1

Semiramis CampusHotel Berlin Science & Conference Center (Berlín, Alemania)

#### **11th NMR User Meeting in South America (2007)**

Congreso

Fontana, C.; Incerti, M.; Manta, E. Structural and Conformational Studies of Bis-Oxane Oxazolidine Analogs of the C3-C19 Fragment of Phorboxazoles

Brasil

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 1

#### **LatQuiMed (2007)**

Congreso

Incerti, F.; Fontana, C.; Manta, E. Estudios Sintéticos, Estructurales y Conformacionales de Análogos del Fragmento Bis-oxano oxazol C3-C19 de los Phorboxazoles

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 1

#### **LatQuiMed (2007)**

Congreso

Fontana, C.; Pezaroglo, H.; Manta, E. Determinación del Peso Molecular Promedio de Heparinas de

Bajo Peso Molecular del Mercado Uruguayo por 13C RMN

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 1

**Jornadas Iberoamericanas de Resonancia Magnética Nuclear. Avances en Resonancia Magnética Nuclear e Interacciones Moleculares (2005)**

Congreso

Fontana, C.; Incerti, M.; Manta, E. Análisis Conformacional de Acetato de 6-(S\*)-[1-(R\*)-acetoxi-3-(4-metoxicarbonil-oxazol-2-il)-propil]-2-(R\*)-[2-(4-metoxicarbonil-oxazol-2-il)-etil]-tetrahidropirán-3-(S\*)-ilo empleando RMN

Bolivia

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 1

Nombre de la institución promotora: AECl y OEA

Palabras Clave: RMN oxazol oxano

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Resonancia Magnética Nuclear

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Elucidación Estructural

**JURADO/INTEGRANTE DE COMISIONES EVALUADORAS DE TRABAJOS ACADÉMICOS**

**Producción y caracterización de la goma extraída de los frutos del género nativo \*Prosopis\* (2018)**

Candidato: Pilar Vilaró

Tipo Jurado: Tesis de Maestría

Carolina Fontana, Sofía Barrios, Gustavo Seoane

Maestría en Ciencia y Tecnología de Alimentos / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

**Indicadores de producción**

<b>PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>24</b>
Artículos publicados en revistas científicas	24
Completo	24
<b>PRODUCCIÓN TÉCNICA</b>	<b>5</b>
Procesos o técnicas	1
Trabajos técnicos	1
Otros tipos	3
<b>EVALUACIONES</b>	<b>10</b>
Evaluación de proyectos	1
Evaluación de publicaciones	1
Evaluación de convocatorias concursables	8
<b>FORMACIÓN RRHH</b>	<b>3</b>
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas	2
Tesis/Monografía de grado	2
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha	1
Tesis de doctorado	1