



ALICIA BEATRIZ MERLINO
MELLOGNIO

PhD

amerlino@fcien.edu.uy
Iguá 4225 CP 11400
2 525 2186

Fecha de publicación: 17/08/2018
Última actualización: 29/12/2017

Datos Generales

INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad de la República/ Facultad de Ciencias - UDeLaR / Laboratorio de Química Teórica y Computacional / Uruguay

DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

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

Dirección: Iguá 4225 / 11400 / Montevideo / Uruguay

Teléfono: (2) 2525-2186

Correo electrónico/Sitio Web: amerlino@fcien.edu.uy

Formación

Formación académica

CONCLUIDA

DOCTORADO

Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) (2007 - 2010)

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

Título de la disertación/tesis: Investigación y desarrollo de nuevos fármacos anti-T. cruzi:

Inhibidores de cruzipaína derivados del sistema benzofuroxano y 1,3 dióxido de benzimidazol

Tutor/es: Dr. Hugo Cerecetto y Dra. Mercedes González

Obtención del título: 2010

Palabras Clave: Inhibidores de cruzipaína

Áreas de conocimiento:

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

GRADO

Licenciatura en Bioquímica (2001 - 2005)

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

Título de la disertación/tesis: Modificaciones estructurales de derivados de di-N-óxido de benzimidazol con actividad anti-T. cruzi

Tutor/es: Dr. Hugo Cerecetto y Dra. Mercedes González

Obtención del título: 2005

Palabras Clave: Derivados de di-N-óxido de benzimidazol

Áreas de conocimiento:

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

Formación complementaria

CONCLUIDA

CURSOS DE CORTA DURACIÓN

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

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

15 horas

Áreas de conocimiento:

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

Computational Modelling and Simulation of Biological Systems (01/2010 - 01/2010)

Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay

85 horas

Palabras Clave: modelado computacional

Areas de conocimiento:

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

Estrés oxidativo en patología humana. Estado Actual y Nuevas estrategias (01/2009 - 01/2009)

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

24 horas

Interações intermoleculares por RMN (01/2009 - 01/2009)

Sector Extranjero/Internacional/Enseñanza superior / Universidade Federal do Rio de Janeiro , Brasil

40 horas

Farmacoterapia I (01/2008 - 01/2008)

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

80 horas

Farmacología (01/2008 - 01/2008)

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

120 horas

Química Farmaceutica 101 (01/2007 - 01/2007)

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

Investigación y Desarrollo de Nuevos Fármacos Para el Tratamiento de la Enfermedad de Chagas (01/2007 - 01/2007)

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

26 horas

Areas de conocimiento:

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

Microscopía de barrido por sondas: métodos y aplicaciones (01/2007 - 01/2007)

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

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

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

Nuevas metodologías en síntesis orgánica y sus aplicaciones (01/2007 - 01/2007)

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

Aislamiento de productos naturales bioactivos (01/2007 - 01/2007)

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

Clusters, Molecules, Biomolecules and Materials (01/2006 - 01/2006)

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

Laboratorio de Fitoquímica (01/2006 - 01/2006)

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

Mecanismos en Química Orgánica (01/2006 - 01/2006)

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

Introducción al QSAR y diseño racional de comps. bioactivos (01/2006 - 01/2006)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR,
Uruguay
30 horas

Química de los Productos Naturales (01/2006 - 01/2006)

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

Elucidación Estructural (01/2006 - 01/2006)

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

3D QSAR strategies in drug design (01/2006 - 01/2006)

, Uruguay
3 horas
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Médica

Espectroscopía de Compuestos Orgánicos (01/2005 - 01/2005)

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

Química Heterocíclica (01/2005 - 01/2005)

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

Nuevas estrategias en el hallazgo de fármacos (01/2005 - 01/2005)

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

Estrategias biomédicas en el diseño de fármacos antitumorales (01/2004 - 01/2004)

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

Curso Taller de Química Computacional (01/2003 - 01/2003)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR,
Uruguay
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica

Bioinorgánica (01/2003 - 01/2003)

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

PARTICIPACIÓN EN EVENTOS

XV Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica (2007)

Tipo: Congreso
Institución organizadora: Sociedad Española de Química Terapéutica, España
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Médica

XIV Jornadas de Jóvenes Investigadores de la AUGM (2006)

Tipo: Encuentro
Institución organizadora: Universidad de Campinas, Brasil

8va Escuela de Invierno Giambiagi: Clusters, Molecules, Biomolecules and Materials (2006)

Tipo: Congreso
Institución organizadora: Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Argentina
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

3rd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry (2006)

Tipo: Congreso
Institución organizadora: Universidad de San Pablo, Brasil
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Médica

XI Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias (2005)

Tipo: Congreso
Institución organizadora: Sociedad Uruguaya de Biociencias, Uruguay
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Médica

RIA y ELISA en cuantificación hormonal (2004)

Tipo: Seminario
Institución organizadora: Laboratorio de Fisiología y Nutrición, Facultad de Ciencias, UDELAR, Uruguay

3as Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular (2004)

Tipo: Congreso
Institución organizadora: Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular, Uruguay
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Médica

Idiomas

Inglés

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

Portugués

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

Español

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

Áreas de actuación

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Médica

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

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

Actuación profesional

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

Facultad de Ciencias - UDeLaR

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (12/2011 - a la fecha)

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

Funcionario/Empleado (07/2009 - 12/2011)

Profesor Adjunto ,32 horas semanales
Escalafón: Docente
Grado: Grado 3
Cargo: Interino

Becario (07/2005 - 06/2006)

Ayudante de Investigación ,40 horas semanales / Dedicación total
Ayudante de Investigación en el proyecto Clinical development of arylethenylbenzofuroxan derivatives as drugs for Chagas Disease. Proyecto dirigido por los Dres. Hugo Cerecetto y Mercedes González y financiado por la DNDi (Drugs for Neglected Diseases initiative). Laboratorio de Química Orgánica. Facultad de Química-Facultad de Ciencias.
Escalafón: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (05/2005 - 07/2005)

Ayudante ,25 horas semanales
Ayudante en el proyecto "Influencia del entorno fisicoquímico sobre la estructura electrónica y reactividad de bases de ADN: hacia el diseño racional de sondas para diagnóstico y fármacos para quimioterapia altamente selectivos de Ru(II)", dirigido por la Dra. Laura Coitiño y financiado por CSIC UdelaR. Laboratorio de Química Teórica y Computacional
Escalafón: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (11/2003 - 07/2004)

Ayudante ,10 horas semanales
Ayudante del Laboratorio de Química Teórica y Computacional, Facultad de Ciencias. Contratado con fondos de Educación Permanente para el Curso Química de la Atmósfera y Polución dictado por el Laboratorio de Química Teórica y Computacional
Escalafón: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Desarrollo de inhibidores de caspasa-3 para el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer (04/2012 - a la fecha)

La enfermedad de Alzheimer (EA) es el desorden neurodegenerativo con mayor prevalencia a nivel mundial para el cual actualmente no existe cura. Una de las principales razones que ha impedido el desarrollo de un tratamiento efectivo para detener o prevenir EA es el desconocimiento de los factores relevantes que causan la enfermedad. La hipótesis clásica formulada hace casi 20 años que

sostiene que EA es causada por la acumulación de depósitos del péptido beta amiloide (A β) (placas seniles) y la consiguiente formación de ovillos neurofibrilares formados por agregación de la proteína Tau ha sido reevaluada en los últimos años. Recientemente se ha observado que existe correlación entre la activación local de la enzima caspasa-3 a nivel de espinas dendríticas en modelos murinos de EA y la aparición de los primeros signos de pérdida de memoria en los ratones. El rol fundamental de caspasa-3 en los estadios iniciales de EA ha sido demostrado a partir de experimentos utilizando un inhibidor peptídico específico de la enzima. El uso de inhibidores de caspasas ha mostrado ser efectivo previniendo la apoptosis en ensayos celulares así como en modelos animales de distintas enfermedades donde un aumento descontrolado en la actividad caspasa conduce a situaciones patológicas. Sin embargo, la mayoría de los inhibidores de caspasas descritos hasta el momento son inhibidores peptídicos irreversibles los cuales en general presentan baja selectividad pudiendo en algunos casos inhibir otras proteasas celulares. Si bien en los últimos años se ha hecho un gran esfuerzo en el desarrollo de inhibidores no peptídicos y reversibles de distintas caspasas, incluyendo caspasa-3, en la mayoría de los casos no existen datos comparativos que den cuenta de su selectividad o no hay información disponible sobre la citotoxicidad de los compuestos o su actividad in vivo. Teniendo en cuenta lo mencionado anteriormente, esta línea de investigación plantea un estudio exhaustivo y sistemático utilizando herramientas de screening in silico que permita la identificación de aquellos determinantes estructurales responsables de la actividad/selectividad frente a caspasa-3. Con esto se pretende organizar la información existente sobre inhibidores de caspasa-3 con el objetivo de diseñar nuevos inhibidores más eficaces y selectivos frente a la enzima. Los compuestos diseñados serán evaluados en primera instancia mediante métodos teóricos de docking molecular a fin de predecir la capacidad de inhibir selectivamente a caspasa-3, lo cual a su vez permitirá el rediseño de nuevas entidades químicas. Aquellos que de acuerdo al modelo resulten activos/selectivos serán sintetizados y evaluados frente a caspasa-3 y otras caspasas a fin de determinar tanto la actividad como la selectividad de los mismos. Los compuestos seleccionados serán evaluados en líneas celulares neuronales a fin de determinar su toxicidad así como el efecto de los mismos en la modulación de procesos apoptóticos exacerbados.

Fundamental

10 horas semanales

Facultad de Ciencias/Instituto de Investigaciones Biológicas Clemente Estab, Laboratorio de

Química Teórica y Computacional/Unidad de Biología Celular, Coordinador o Responsable

Equipo: HERNÁNDEZ, P., LAVAGGI, M.L., MININI, L., FERRARO, F., CANCELA, S

Palabras clave: inhibidores de caspasa-3 diseño de fármacos asistido por computadora enfermedad de Alzheimer

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Medicinal

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Diseño racional y síntesis de inhibidores irreversibles de enzimas de T. cruzi (02/2011 - a la fecha)

Proyecto colaborativo con el Dr. Hugo Cerecetto y la Dra. Mercedes González del Laboratorio de Química Orgánica, Facultad de Ciencias. Tipo de participación: Responsable del diseño racional de potenciales inhibidores de las enzimas triosafosfato isomerasa (TIM) y cruzipaína de T. cruzi utilizando herramientas teóricas. Durante este período se han realizado estudios de docking de una serie de inhibidores de TIM a fin de explicar a nivel molecular los rasgos estructurales responsables de los datos de inhibición obtenidos experimentalmente. Estos resultados fueron presentados en la XL reunión anual de la SBBq. En el presente año se realizarán estudios de dinámica molecular sobre los complejos TIM-inhibidor con el objetivo de publicar el trabajo en una revista arbitrada.

3 horas semanales

Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:3

Maestría/Magister:1

Equipo: GONZÁLEZ, M. (Responsable), CERECETTO, H. (Responsable), ÁLVAREZ, G, VARELA, J, MININI, L, MARTÍNEZ, J

I+D de inhibidores selectivos de caspasa-3 como potenciales fármacos para el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer (04/2015 - 04/2017)

10 horas semanales

Facultad de Ciencias, Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2

Maestría/Magister:1

Financiación:

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

Equipo: HERNÁNDEZ, P. (Responsable), LAVAGGI, M.L., MININI, L., FERRARO, F., CANCELA, S., CORVO, I.

Inhibición selectiva de Triosafosfato Isomerasa (TIM) como estrategia para el desarrollo de fármacos de uso veterinario contra la garrapata *Rhipicephalus microplus* (03/2014 - 12/2015)

Cooperación bilateral con brasil CNPq-DICyT

3 horas semanales

Facultad de Ciencias, Laboratorio de Química Teórica y Computacional/Grupo de Química Medicinal

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Maestría/Magister:1

Doctorado:1

Financiación:

Facultad de Ciencias - UDeLaR, Uruguay, Cooperación

Equipo: CABRERA, M., ÁLVAREZ, G., MININI, L., CORVO, I., RANDALL, L.

Diseño y Síntesis de profármacos con mecanismo de acción dual para el tratamiento de tumores sólidos (05/2013 - 05/2015)

Colaboradora y responsable del diseño racional asistido por computadora de distintos profármacos

10 horas semanales

Facultad de Ciencias, Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Maestría/Magister:1

Financiación:

Agencia Nacional de Investigación e Innovación, Uruguay, Apoyo financiero

Equipo:

Caracterización fisicoquímica de distintos ácidos grasos nitrados y estudios teóricos de su interacción con las enzimas ciclooxigenasas I y II (06/2010 - 12/2013)

Proyecto colaborativo con el Dr. Homero Rubbo (Departamento de Bioquímica y Centro de Radicales Libres e Investigación Biomédica, Facultad de Medicina). En este período he estudiado mediante métodos de docking la interacción de distintos derivados nitrados del ácido araquidónico con las enzimas ciclooxigenasas I y II.

10 horas semanales

Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Maestría/Magister:2

Equipo: MERLINO, A., RUBBO, H (Responsable), TROSTCHANSKY, A., PORTILLO, S., BONILLA, L., COITIÑO, E.L.

Palabras clave: ácidos grasos nitrados COX-1 y COX-2 docking molecular

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química teórica y computacional

Desarrollo de terapias antineoplásicas sensibilizadoras para células tumorales hipóxicas (12/2011 - 12/2013)

Actualmente la investigación y desarrollo de nuevos fármacos para el tratamiento del cáncer está orientada a mejorar su efectividad y selectividad de forma de disminuir los efectos secundarios indeseados de la mayoría de los fármacos de uso clínico actual. Un problema aún mayor es el tratamiento de las células hipóxicas de los tumores sólidos. Estas células se encuentran alejadas de

los vasos sanguíneos resultando en un aumento en la resistencia a la quimio y radioterapia. Por otro lado una aproximación terapéutica de reciente desarrollo es el pre-tratamiento o sensibilización de las células tumorales con inhibidores de deacetilasas de histonas (iHDACs) previo al tratamiento con el fármaco de elección. El desarrollo actual de iHDACs está orientado a la generación de inhibidores más selectivos para HDACs de clase I o de clase II. Recientemente se ha encontrado que la HDAC7, de clase II, está relacionada con la disminución de la expresión de genes relacionados la supervivencia de la célula tumoral en condiciones de hipoxia. De esta forma en el presente proyecto se plantea desarrollar un método predictivo de actividad anti-HDAC7 mediante métodos teóricos de docking molecular y estudiar el efecto de sensibilización de las células tumorales hipóxicas con inhibidores de deacetilasas de histonas selectivos para HDAC7.

5 horas semanales

Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Orgánica

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Doctorado:1

Equipo: GONZÁLEZ, M., MERLINO, A., CABRERA, M, LAVAGGI, M.L (Responsable), LÓPEZ, WM, GONDA, M

Estudios teóricos de la interacción de galactósidos sintéticos con las enzimas galectina-1 y concanavalina A (02/2013 - 12/2013)

Responsable científica en el marco de la colaboración establecida en Diciembre 2012 entre la Dra. Cecilia Giacomini (Cátedra de Bioquímica, Facultad de Química) y quien escribe

5 horas semanales

Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Financiación:

Facultad de Ciencias - UDeLaR, Uruguay, Cooperación

Equipo: PORCAL, W., GIACOMINI, C.

Modelado de la interacción de complejos de vanadio y platino con la enzima fumarato reductasa de Leishmania major y Trypanosoma cruzi (03/2011 - 12/2012)

Responsable científica en el marco de la colaboración que nuestro grupo mantiene con la Dra. Dinorah Gambino. Durante este período he realizado el modelado por homología de la enzima fumarato reductasa de L. major debido a la ausencia de estructuras cristalográficas. Dicho modelo se utilizó posteriormente en estudios de docking para predecir el sitio de unión y la capacidad inhibitoria de uno de los complejos de vanadio

2 horas semanales

Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Desarrollo

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:1

Equipo: COITIÑO, L, GAMBINO, D. (Responsable), VIEITES, M

Estudio de la relación estructura-actividad biológica de distintos complejos de Pt(II)/Pd(II) conteniendo agrupamientos 5-nitrofuriltiosemicarbazona (03/2010 - 06/2011)

Responsable científica en el marco de la colaboración que nuestro grupo mantiene con la Dra. Dinorah Gambino (Cátedra de Química Inorgánica, Facultad de Química). En este período se completaron exitosamente los cálculos DFT/PCM de los ligandos tiosemicarbazona y los distintos complejos de Pt/Pd comenzados en 2010, se realizaron estudios de data mining y docking molecular. Los resultados obtenidos han permitido la publicación en 2011 de un artículo en la revista Eur. J. Med. Chem. Durante este período se inició y completó la caracterización fisicoquímica de una segunda serie de complejos de Pt/Pd relacionados con los anteriores. Actualmente se están analizando los resultados, los cuales se espera den lugar a dos publicaciones adicionales en revistas arbitradas.

10 horas semanales

Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Equipo: COITIÑO, L, GAMBINO, D. (Responsable), OTERO, L

Palabras clave: complejos de Pt(II)/Pd(II)

Caracterización in silico de la interacción de una serie de complejos de Renio con seroalbúmina (02/2010 - 12/2010)

en el marco de la colaboración establecida entre la Dra. Fernanda Cerdá del Laboratorio de Biomateriales de Facultad de Ciencias y la Dra. Laura Coitiño. Tipo de participación: Durante este período he realizado estudios de docking de una serie de compuestos de Re(V) con seroalbúmina humana cuyos resultados dieron lugar a la presentación de un póster en un congreso internacional (Ver apartado 3.1). Actualmente, se están realizando estudios análogos con seroalbúmina bovina a fin de comparar los resultados teóricos con datos experimentales.

2 horas semanales

Desarrollo

Integrante del Equipo

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Maestría/Magister:1

Equipo: COITIÑO, L (Responsable) , CERDÁ, F (Responsable) , BONANATA, J

Influencia del entorno fisicoquímico sobre la estructura electrónica y reactividad de bases de ADN: hacia el diseño racional de sondas para diagnóstico y fármacos para quimioterapia altamente selectivos de Ru(II) (07/2009 - 11/2010)

Durante este período he trabajado en la optimización en solución a nivel DFT de distintos complejos de Ru (II)

10 horas semanales

Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Equipo: COITIÑO, L (Responsable)

Estudios sobre las propiedades y el mecanismo de acción molecular de fármacos de la familia del Cisplatino y análogos en su acción como agentes anticancerígenos (11/2009 - 05/2010)

Durante este período he trabajado en la difusión de parte de los resultados de este proyecto (preparación y presentación de un póster, preparación de un artículo para ser enviado a una revista arbitrada)

6 horas semanales

Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Equipo: DANS, P , COITIÑO, L (Responsable) , PITTINI, A.

Palabras clave: complejos de Pt(II)

Clinical development of arylethenylbenzofuroxan derivatives as drugs for Chagas Disease (07/2005 - 06/2006)

40 horas semanales

Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Orgánica

Investigación

Integrante del Equipo

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Especialización:3

Doctorado:3

Financiación:

Institución del exterior, Apoyo financiero

Equipo: BOIANI, M. , PORCAL, W. , GONZÁLEZ, M. (Responsable) , CERECETTO, H. (Responsable) , GERPE, A , CABRERA, M , LAVAGGI, M.L

Areas de conocimiento:

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

Influencia del entorno fisicoquímico sobre la estructura electrónica y reactividad de bases de ADN: hacia el diseño racional de sondas para diagnóstico y fármacos para quimioterapia altamente selectivos de Ru(II) (05/2005 - 07/2005)

25 horas semanales
Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Teórica y Computacional
Investigación
Integrante del Equipo
En Marcha
Alumnos encargados en el proyecto:
Pregrado:3
Doctorado:1
Financiación:
Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR, Uruguay, Apoyo financiero
Equipo: DANS, P , MACHADO, M , MOURGLIA, G , COITIÑO, L (Responsable)
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica

Investigación y desarrollo de fármacos antichagásicos con un mecanismo de acción dual (06/2004 - 07/2005)

20 horas semanales
Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Orgánica
Investigación
Integrante del Equipo
Concluido
Alumnos encargados en el proyecto:
Pregrado:1
Especialización:1
Doctorado:2
Equipo: BOIANI, M. , GONZÁLEZ, M. , CERECETTO, H. (Responsable) , AGUIRRE, G. , GERPE, A
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Médica

Estructura molecular y características espectrales de interruptores moleculares de luz compuestos de [Ru(II)(L)2(dppz)]²⁺ y su posible uso en la detección de alteraciones del ADN (04/2003 - 05/2005)

20 horas semanales
Instituto de Química Biológica , Laboratorio de Química Teórica y Computacional
Investigación
Integrante del Equipo
Concluido
Alumnos encargados en el proyecto:
Pregrado:1
Doctorado:1
Equipo: DANS, P
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica

DOCENCIA

Licenciatura en Bioquímica (08/2009 - a la fecha)

Grado
Asistente
Asignaturas:
Físicoquímica Moderna, 8 horas, Teórico-Práctico
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica

Curso posgrado PEDECIBA QUIMICA (12/2016 - 12/2016)

Doctorado
Responsable
Asignaturas:
Predicción y análisis in silico de la estructura e interacciones de proteínas en diálogo con la experimentación, 45 horas, Teórico-Práctico

Curso CABBIO (06/2016 - 06/2016)

Especialización

Invitado

Asignaturas:

Estudio in silico de interacciones fármaco-proteína en el curso internacional de posgrado

Desarrollo de terapias novedosas para la inflamación crónica, 4 horas, Teórico-Práctico

Licenciatura Bioquímica/Ciencias Biológicas (03/2013 - 05/2013)

Especialización

Invitado

Asignaturas:

Laboratorio de Química Bioorgánica, 10 horas, Teórico-Práctico

Licenciatura en Bioquímica (03/2012 - 06/2012)

Especialización

Asistente

Asignaturas:

Curso taller de química teórica y computacional, 8 horas, Teórico-Práctico

Profundización (UDELAR - PEDECIBA QUIMICA (03/2012 - 03/2012)

Especialización

Responsable

Asignaturas:

Herramientas bioinformáticas y su aplicación al diseño racional de fármacos., 30 horas, Teórico-Práctico

Licenciatura en Bioquímica/Ciencias Biológicas (11/2011 - 12/2011)

Especialización

Invitado

Asignaturas:

Laboratorio de Química Bioorgánica, 20 horas, Teórico-Práctico

Licenciatura Bioquímica/Ciencias Biológicas (09/2010 - 12/2010)

Pregrado

Invitado

Asignaturas:

Laboratorio de Química Bioorgánica, 4 horas, Teórico-Práctico

(03/2010 - 06/2010)

Especialización

Asistente

Asignaturas:

Curso taller de química teórica y computacional, 8 horas, Teórico-Práctico

Licenciatura en Bioquímica (03/2004 - 07/2004)

Pregrado

Asignaturas:

Curso Taller de Química Computacional, 1 horas, Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Licenciatura en Bioquímica (10/2003 - 12/2003)

Pregrado

Asignaturas:

Físicoquímica II, 2 horas, Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica

OTRA ACTIVIDAD TÉCNICO-CIENTÍFICA RELEVANTE

Participación en el dictado del curso de Educación Permanente Diseño y Visualización asistida por PC de la estructura 3D de moléculas y macromoléculas (07/2004 - 07/2004)

Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Química Teórica y Computacional
6 horas semanales

Actividades de soporte al dictado del curso de Educación Permanente de Química de la Atmósfera y Polución (11/2003 - 11/2003)

Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Química Teórica y Computacional
20 horas semanales

Tareas de soporte en el desarrollo del material para el curso de Ciencias Físico-Químicas de 3er año de Educación Secundaria en el marco del convenio con ANEP obtenido por el Laboratorio de Química Teórica y Computacional (04/2003 - 08/2003)

Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Química Teórica y Computacional
20 horas semanales

GESTIÓN ACADÉMICA

Suplente de Laura Coitiño en la Comisión de Informática (03/2011 - a la fecha)

Facultad de Ciencias, Laboratorio de Química Teórica y Computacional
Participación en consejos y comisiones

Suplente en la Comisión de Instituto del IQB (03/2014 - a la fecha)

Facultad de Ciencias, Instituto de Química Biológica
Participación en consejos y comisiones

Titular (06/2016 - a la fecha)

Facultad de Ciencias, Instituto de Química Biológica
Participación en consejos y comisiones

Clautrista suplente (09/2016 - a la fecha)

Facultad de Ciencias
Participación en cogobierno

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - PORTUGAL

Universidade do Porto

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (02/2012 - 03/2012)

,40 horas semanales
Pasantía de Investigación

ACTIVIDADES

PASANTÍAS

(02/2012 - 03/2012)

Universidad de Porto, Theoretical and Computational Biochemistry Group
40 horas semanales

SECTOR GOBIERNO/PÚBLICO - AGENCIA NACIONAL DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN - URUGUAY

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Becario (07/2009 - 06/2010)

Estudiante de Doctorado ,25 horas semanales

Becario (01/2008 - 06/2009)

Estudiante de Doctorado ,40 horas semanales

Becario (11/2008 - 11/2008)

Pasantía de Investigación ,40 horas semanales

Beca del programa de intercambio científico regional de la Red AMSUD-Pasteur y la Agencia Nacional de Investigación e Innovación (ANII) para realización de una pasantía de investigación.

ACTIVIDADES

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Diseño y Síntesis de profármacos con mecanismo de acción dual para el tratamiento de tumores sólidos (03/2013 - 03/2015)

2 horas semanales

Facultad de Ciencias , Grupo de Química Medicinal

Investigación

Otros

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:1

Maestría/Magister:2

Equipo: MERLINO, A. , LAVAGGI, M.L (Responsable) , MININI, L

Cisteín proteasas de *T. cruzi* como blanco terapéutico para el tratamiento de la enfermedad de Chagas (02/2009 - 02/2011)

La enfermedad de Chagas, causada por el protozoo Trypanosoma cruzi, afecta a unos 20 millones de personas en América Latina, ubicándose a nivel mundial en tercer lugar entre las afecciones parasitarias. Actualmente no existe un tratamiento satisfactorio para esta enfermedad, sin embargo distintas entidades bioquímicas han sido identificadas como potenciales dianas terapéuticas. Entre ellas, la enzima cruzipaina, principal cisteín proteasa de *T. cruzi*, es una enzima clave para el desarrollo y supervivencia del parásito dentro de la célula del huésped, lo que la convierte en un excelente blanco terapéutico. Teniendo en cuenta lo anterior, en el marco de mi tesis de posgrado he trabajado en la investigación y desarrollo de nuevos agentes tripanosomicidas híbridos que combinan dos sistemas farmacofóricos, un farmacóforo responsable de la inhibición de cruzipaina (agrupamientos vinilsulfona, tiosemicarbazona, semicarbazona, guanilhidrazona o trisilquidguanidina) y la estructura bioactiva de los líderes desarrollados por nuestro grupo (sistemas benzofuroxano y 1,3-dióxido de benzimidazol). Con la experiencia acumulada hasta el momento, en el marco del presente proyecto se pretende avanzar en la síntesis, caracterización y evaluación de nuevos compuestos híbridos así como en la modificación estructural de los compuestos previamente sintetizados a fin de obtener productos que resulten buenos inhibidores de la enzima. La posibilidad de poder realizar lo mencionado anteriormente resulta importante para hacer más dinámica la etapa de evaluación de los potenciales fármacos, lo cual es crucial en la generación del conocimiento científico necesario para retroalimentar el diseño y desarrollo de compuestos que resulten futuros fármacos para esta enfermedad olvidada.

40 horas semanales

Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Orgánica

Investigación

Coordinador o Responsable

Concluido

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:1

Equipo: GONZÁLEZ, M. , CERECETTO, H. , MERLINO, A. (Responsable) , ROBELLO, C. , TINOCO, LW.

Palabras clave: Enfermedad de Chagas Cruzipaina Inhibidores reversibles

Areas de conocimiento:

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

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/ENSEÑANZA SUPERIOR - BRASIL

Universidade Federal do Rio de Janeiro

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (05/2010 - 05/2010)

Pasantía de Investigación ,40 horas semanales

Otro (11/2009 - 12/2009)

Pasantía de Investigación ,40 horas semanales

ACTIVIDADES

PASANTÍAS

(05/2010 - 05/2010)

Nucleo de Investigación de Productos Naturales, Laboratorio Multiusuario de Análisis por RMN
40 horas semanales

(11/2009 - 12/2009)

Nucleo de Investigación de Productos Naturales, Laboratorio Multiusuario de Análisis por RMN
40 horas semanales

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ARGENTINA

Universidad Nacional de San Martín

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (11/2008 - 11/2008)

Pasantía de Investigación ,40 horas semanales

ACTIVIDADES

PASANTÍAS

(11/2008 - 11/2008)

Instituto de Investigaciones Biotecnológicas, Laboratorio de Bioquímica y Metabolismo Celular
40 horas semanales

Areas de conocimiento:

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

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

Facultad de Química - UDeLaR

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Becario (12/2007 - 01/2008)

Beca de Doctorado PEDECIBA-Química ,40 horas semanales

Escalafón: No Docente

Cargo: Interino

Becario (06/2006 - 12/2007)

Beca de Maestría PEDECIBA-Química ,40 horas semanales

Escalafón: No Docente

Cargo: Interino

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Investigación y desarrollo de nuevos fármacos anti T. Cruzi: Inhibidores de cruzipaína derivados del sistema benzofuroxano y 1,3-dióxido de benzimidazol (06/2006 - 11/2010)

Este trabajo se enmarca en mi tesis de posgrado (Facultad de Química, con Beca de posgrado de PEDECIBA-Química). Teniendo en cuenta que las distintas familias de inhibidores de Cruzipaína descritos en la literatura presentan desventajas claras en el momento de aplicarse sobre el parásito entero y considerando que la enzima es una diana interesante para el desarrollo de nuevos fármacos antichagásicos, el proyecto de tesis propone la investigación y desarrollo de nuevos agentes tripanosomicidas híbridos que combinen dos sistemas farmacofóricos, en este caso un farmacóforo responsable de la inhibición de esta enzima (agrupamientos vinilsulfona, tiosemicarbazona, semicarbazona, guanilhidrazona o bisalquilaminoguanidina) y la estructura bioactiva de los líderes desarrollados por nuestro grupo (sistemas benzofuroxanos y 1,3-dióxido de benzimidazol).

40 horas semanales

Instituto de Química Biológica, Laboratorio de Química Orgánica , Coordinador o Responsable

Equipo: GONZÁLEZ, M., CERECETTO, H.

Áreas de conocimiento:

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

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/CENTROS CIENTÍFICO-TECNOLÓGICOS - ESPAÑA

Consejo Superior de Investigaciones Científicas

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (09/2007 - 10/2007)

Pasantía de Investigación ,40 horas semanales

ACTIVIDADES

PASANTÍAS

(09/2007 - 10/2007)

Instituto de Química Médica

40 horas semanales

Áreas de conocimiento:

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

SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ESPAÑA

Universidad de Navarra

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (02/2006 - 05/2006)

Pasantía de Investigación ,40 horas semanales

ACTIVIDADES

PASANTÍAS

(02/2006 - 05/2006)

Centro de Investigación en Farmacología Aplicada, Unidad de Investigación y Desarrollo de Medicamentos

40 horas semanales

Áreas de conocimiento:

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

CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: 10 horas
Carga horaria de investigación: 26 horas
Carga horaria de formación RRHH: 4 horas
Carga horaria de extensión: Sin horas
Carga horaria de gestión: Sin horas

Producción científica/tecnológica

En el año 2010 defendí la Tesis de Doctorado, dirigida por los Dres. Hugo Cerecetto y Mercedes González. Durante el desarrollo del proyecto de tesis se trabajó en el diseño y síntesis de nuevos fármacos antichagásicos híbridos, estudiándose la actividad frente a *T. cruzi*, toxicidad inespecífica frente a células mamíferas y actividad frente a cruzipaina utilizando abordajes experimentales y computacionales. Los resultados obtenidos durante mis estudios de posgrado han dado lugar a dos publicaciones en la revista Medicinal Chemistry Communications. Desde Junio de 2009, ocupo el cargo de Profa. Adjunta en el Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC) donde continúo trabajando en el estudio de interacciones ligando-proteína utilizando técnicas teóricas de docking y dinámica molecular (estudio del modo de interacción de nitroalquenos con las proteínas COX-1 y COX-2, predicción de la estructura 3D de la enzima fumarato reductasa de *T. cruzi* y *Leishmania* mayor y estudio de la capacidad inhibitoria de compuestos de V(IV), Pt(II) y Pd(II), utilización de métodos QSAR basados en agrupamiento jerárquico y análisis de componentes principales para predecir la actividad anti-cancerígena de distintos complejos de Pt(IV) así como para la predicción de la actividad anti *T. cruzi* y mecanismo de acción de distintos complejos de Pt(II)/Pd(II) conteniendo tiosemicarbazonas como ligandos, diseño racional de inhibidores de las enzimas cruzipaina y triosafosfato isomerasa de *T. cruzi*) en colaboración con distintos grupos de investigación. Estos trabajos han dado lugar a diversas presentaciones en congresos nacionales e internacionales y a publicaciones en revistas arbitradas. En 2012 he comenzado a trabajar en la línea de investigación 'Desarrollo de inhibidores de caspasa-3 para el tratamiento de la enfermedad de Alzheimer de la cual soy responsable participando en el diseño y supervisión de estudios teóricos enfocados a identificar determinantes estructurales responsables de la actividad/selectividad frente a caspasa-3 y que constituirán una base sólida para el diseño racional de nuevas entidades químicas. La Lic. Lucía Minini comenzó en 2013 su Posgrado en Química en este tema bajo mi orientación y la de la Dra. María Laura Lavaggi. En 2014 fue beneficiaria de una Beca de Maestría ANII, realizando en diciembre de 2015 la defensa intermedia para pasaje a estudios de Doctorado que está realizando bajo mi orientación y la de las Dras. Lavaggi y Beatriz Álvarez y en 2016 le fue otorgada una beca de doctorado ANII. Además, en el periodo 2014-2015 la Lic. Saira Cancela realizó su Tesina de Graduación de Licenciatura en Bioquímica también en esta temática bajo mi dirección y la de la Dra. Paola Hernández y fue beneficiaria de una Beca ANII de Iniciación a la Investigación. Actualmente está desarrollando el Posgrado en Química, bajo mi orientación y la co-orientación de las Dras. Paola Hernández y Patricia Lagos. En 2015, nos fue financiado un proyecto CSIC I+D del cual soy responsable, lo que nos ha permitido avanzar considerablemente en el hallazgo de nuevos inhibidores reversibles de caspasa-3. En el ámbito docente participo activamente desde 2009 en el dictado de los cursos regulares del LQTC (grado/especialización).

Producción bibliográfica

ARTÍCULOS PUBLICADOS

ARBITRADOS

Novel Imidazo[4,5-c][1,2,6]thiadiazine 2,2-dioxides as antiproliferative trypanosoma cruzi drugs: Computational screening from neural network, synthesis and in vivo biological properties (Completo, 2017)

GUERRA, A, GONZALEZ-NARANJO, P, CAMPILLO, NE, VARELA, J, LAVAGGI, ML, MERLINO, A, CERECETTO, H., GONZÁLEZ, M., GOMEZ-BARRIO, A, ESCARIO, JA, FONSECA-BERZAL, C, YALUF, G, PANIAGUA-SOLIS, J, PáEZ, JA
European Journal of Medicinal Chemistry (electrónico), v.: 136 2017
Medio de divulgación: Internet
ISSN: 17683254
DOI: [10.1016/j.ejmech.2017.04.075](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2017.04.075)

Identification of Chalcones as Fasciola hepatica Cathepsin L Inhibitors Using a Comprehensive Experimental and Computational Approach (Completo, 2016)

FERRARO, F., MERLINO, A., DELL'OCA, N, GIL J., TORT J.F., GONZÁLEZ, M., CERECETTO, H., CABRERA, M, CORVO, I.
PLoS Neglected Tropical Diseases, v.: 10 7, 2016

Medio de divulgación: Internet
ISSN: 19352735
DOI: [10.1371/journal.pntd.0004834](https://doi.org/10.1371/journal.pntd.0004834)
<http://journals.plos.org/plosntds/article?id=10.1371/journal.pntd.0004834>
WEB OF SCIENCE™

Potent and Selective Inhibitors of Trypanosoma cruzi Triosephosphate Isomerase with Concomitant Inhibition of Cruzipain: Inhibition of Parasite Growth through Multitarget Activity (Completo, 2016)

AGUILERA, E., VARELA, J., BIRRIEL, E., SERNA, E., TORRES, S., YALUFF, G., VERA DE BILBAO, N., AGUIRRE-LÓPEZ, B., CABRERA, N., DÍAZ MAZARIEGOS, S., TUENA DE GÓMEZ-PUYOU, M., TUENA DE GÓMEZ-PUYOU, M., PÉREZ-MONTFORT, R., MININI, L., MERLINO, A., CERECETTO, H., GONZÁLEZ, M., ÁLVAREZ, G
ChemMedChem (E), 2016
Medio de divulgación: Internet
Lugar de publicación: Wiley
Escrito por invitación
ISSN: 18607187
DOI: [10.1002/cmdc.201500385](https://doi.org/10.1002/cmdc.201500385)
[http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/\(ISSN\)1860-7187](http://onlinelibrary.wiley.com/journal/10.1002/(ISSN)1860-7187)

Susceptibility and resistance to Echinococcus granulosus infection: Associations between mouse strains and early peritoneal immune responses (Completo, 2016)

MOURGLIA-ETTLIN, G., MERLINO, A., CAPURRO, R., DEMATTEIS, S
Immunobiology, v.: 221 p.:418 - 426, 2016
Medio de divulgación: Internet
Lugar de publicación: Elsevier
ISSN: 01712985
DOI: [10.1016/j.imbio.2015.11.012](https://doi.org/10.1016/j.imbio.2015.11.012)
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0171298515300991>
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Analgesic and Anti-Inflammatory Properties of Arylnitroalkenes (Completo, 2015)

CELANO, L., CUPERTINO DA SILVA, YK., CATALDO, N., GABAY, M., MERLINO, A., ALEXANDRE-MOREIRA, MS., MOREIRA LIMA, L., CERECETTO, H., GONZÁLEZ, M., THOMSON, L.
Inflammation and Allergy - Drug Targets, v.: 14 p.:19 - 28, 2015
Palabras clave: Antioxidants prostaglandin H synthase inhibitors inflammation anti-inflammatory therapy analgesia
Medio de divulgación: Internet
Lugar de publicación: Bentham
ISSN: 18715281
DOI: [10.2174/1871528114666151022145930](https://doi.org/10.2174/1871528114666151022145930)
<http://www.eurekaselect.com/135973/article>
Scopus®

Aromatic amine N-oxide organometallic compounds: searching for prospective agents against infectious diseases (Completo, 2015)

RODRIGUEZ ARCE, E., MOSQUILLO, MF., PÉREZ, L., ETCHEVERRÍA, G., PIRO, OE., MERLINO, A., COITIÑO, E.L., RIBEIRO, CM., LEITE, CQF., PAVAN, FR., OTERO, L., GAMBINO, D.
Dalton Transactions, v.: 44 p.:14453 - 14464, 2015
Medio de divulgación: Internet
Lugar de publicación: pub.rsc.org
ISSN: 14779226
DOI: [10.1039/C5DT00557D](https://doi.org/10.1039/C5DT00557D)
<http://pubs.rsc.org/en/content/articlelanding/2015/dt/c5dt00557d#!divAbstract>
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Molecular docking and molecular dynamics simulation studies of Trypanosoma cruzi triosephosphate isomerase inhibitors. Insights into the inhibition mechanism and selectivity (Completo, 2015)

MININI, L., ÁLVAREZ, G., GONZÁLEZ, M., CERECETTO, H., MERLINO, A.
Journal of molecular graphics & modelling, v.: 58 p.:40 - 49, 2015
Palabras clave: molecular docking TcTIM-inhibitors Molecular dynamics Selective TcTIM inhibitors Dimer-disrupting inhibitors Rational drug design
Áreas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Elsevier Masson SAS

ISSN: 10933263

DOI: [10.1016/j.jmgm.2015.02.002](https://doi.org/10.1016/j.jmgm.2015.02.002)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

New chemotypes as *Trypanosoma cruzi* triosephosphate isomerase inhibitors. Deepening the mechanism of inhibition (Completo, 2014)

ÁLVAREZ, G., AGUIRRE-LÓPEZ, B., CABRERA, N., TUENA DE GÓMEZ-PUYOU, M., GÓMEZ PUYOU, A., PÉREZ-MONTFORT, R., MERLINO, A., GONZÁLEZ, M., CERECETTO, H.

Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry, v.: 29 p.:198 - 204, 2014

Areas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Informa Healthcare

ISSN: 14756366

DOI: [10.3109/14756366.2013.765415](https://doi.org/10.3109/14756366.2013.765415)

<http://informahealthcare.com/loi/enz>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Homology Modeling of *T. cruzi* and *L. major* NADH-dependent Fumarate Reductases: Ligand Docking, Molecular Dynamics Validation, and Insights on their Binding Modes (Completo, 2014)

MERLINO, A., VIEITES, M., GAMBINO, D., COITIÑO, E.L.

Journal of molecular graphics & modelling, v.: 48 p.:47 - 59, 2014

Palabras clave: NADH-dependent fumarate reductase 3D structure trypanosome fumarate reductases inhibitors anti-trypanosomatids rational designcomputational modeling

NADH/fumarate binding mode

Areas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Elsevier Masson SAS

ISSN: 10933263

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/10933263>

DOI: 10.1016/j.jmgm.2013.12.001

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Identification of novel benzimidazole derivatives as anti-*Trypanosoma cruzi* agents: solid-phase synthesis, structureactivity relationships and molecular docking studies (Completo, 2013)

RÍOS, N., VARELA, J., BIRRIEL, E., GONZÁLEZ, M., CERECETTO, H., MERLINO, A., PORCAL, W.

Future Medicinal Chemistry (E), v.: 5 15, p.:1719 - 1732, 2013

Palabras clave: molecular docking Benzimidazole derivatives Microwave-assisted solid-phase synthesis SAR studies

Areas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Future Science Ltd

ISSN: 17568927

DOI: [10.4155/fmc.13.160](https://doi.org/10.4155/fmc.13.160)

<http://www.future-science.com/doi/pdf/10.4155/fmc.13.160>

Scopus®

Understanding the solid forms of 5E-phenylethenylbenzofuroxan with different in vivo anti-*T. cruzi* activity (Completo, 2013)

HONORATO, S.B., PORCAL, W., MERLINO, A., ELLENA, J., CERECETTO, H., AYALA, A.P., GONZÁLEZ, M.

Revista Virtual de Química, v.: 5 p.:1179 - 1190, 2013

Palabras clave: anti-*T. cruzi* agents 5E-Phenylethenylbenzofuroxan solubility bioavailability

Areas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

Medio de divulgación: Internet
Lugar de publicación: Internet
ISSN: 19846835
DOI: [ISSN 1984-6835](https://doi.org/10.1039/c1rv00000x)
www.uff.br/RVQ/

Scopus®  

Amidines bearing benzofuroxan or benzimidazole 1,3-dioxide core scaffolds as Trypanosoma cruzi-inhibitors: Structural basis for their interactions with cruzipain (Completo, 2012)

MERLINO, A. , BENÍTEZ, D. , CAMPILLO, NE , PÁEZ, JA , TINOCO, LW , GONZÁLEZ, M. , CERECETTO, H.

MedChemComm, v.: 3 p.:90 - 101, 2012

Palabras clave: Cruzipaina docking RMN inhibidores

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: RCS Publishing

ISSN: 20402503

DOI: [10.1039/c1md00223f](https://doi.org/10.1039/c1md00223f)

<http://pubs.rsc.org/en/journals/journalissues/md>

Scopus®  WEB OF SCIENCE™

In Search of Patterns over Physicochemical Properties and Pharmacological Activities for a Set of [MCl2(Thiosemicarbazone)] Complexes (M=Pt/Pd): Support for Multiple Mechanisms of Antichagasic Action Excluding DNA-Bonding in vivo? (Completo, 2011)

MERLINO, A. , OTERO , GAMBINO , COITIÑO

European Journal of Medical Chemistry, v.: 46 p.:2639 - 2651, 2011

Palabras clave: Chagas disease Pt/Pd-thiosemicarbazone complexes SAR on PCM/DFT descriptors molecular docking nitro-anion radicals

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Elsevier Masson SAS

ISSN: 02235234

DOI: [10.1016/j.ejmech.2011.03.046](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2011.03.046)

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/02235234>

Scopus®  WEB OF SCIENCE™

Thiosemicarbazones derived from 1-indanones as new anti-Trypanosoma cruzi agents (Completo, 2011)

CAPUTTO, ME , FABIAN, LE , MOGILIONI, AG , MOLTRASIO, GY , BENÍTEZ, D. , MERLINO, A. , RÍOS, N , CERECETTO, H. , GONZÁLEZ, M. , FINKIELSZTEIN, LM

European Journal of Medicinal Chemistry (electrónico), v.: 19 p.:6818 - 6826, 2011

Palabras clave: thiosemicarbazones molecular docking cruzipain inhibitors

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Elsevier Masson SAS

ISSN: 17683254

DOI: [10.1016/j.bmc.2011.09.037](https://doi.org/10.1016/j.bmc.2011.09.037)

http://www.elsevier.com/wps/find/journaldescription.cws_home/505813/description#description

Development of a second generation of amidinohydrazones, thio- and semicarbazones as Trypanosoma cruzi inhibitors bearing the benzofuroxan and benzimidazole 1,3-dioxide core scaffolds (Completo, 2010)

MERLINO, A. , BENÍTEZ, D. , CHÁVEZ, S. , DA CUNHA, J. , HERNÁNDEZ, P. , TINOCO, LW , CAMPILLO, N. , PÁEZ, J.A. , CERECETTO, H. , GONZÁLEZ, M.

MedChemComm, v.: 1 p.:216 - 228, 2010

Palabras clave: docking cruzipain amidinohydrazones thiosemicarbazones

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: RCS Publishing

ISSN: 20402503

DOI: [10.1039/b000000x](https://doi.org/10.1039/b000000x)

<http://pubs.rsc.org/en/Content/ArticleLanding/2010/MD/COMD00085J>

Massive screening yields novel and selective Trypanosoma cruzi triosephosphate isomerase dimer-interface-irreversible inhibitors with anti-trypanosomal activity (Completo, 2010)

ÁLVAREZ, G., AGUIRRE-LÓPEZ, B., VARELA, J., CABRERA, M., MERLINO, A., LÓPEZ, G.V., LAVAGGI, M.L., PORCAL, W., DI MAIO, R., GONZÁLEZ, M., CERECETTO, H., CABRERA, N., PÉREZ-MONTFORT, R., TUENA DE GÓMEZ-PUYOU, M., TUENA DE GÓMEZ-PUYOU, M.
European Journal of Medicinal Chemistry (electrónico), v.: 45 p.:5767 - 5772, 2010

Palabras clave: T. cruzi TIM Massive screening

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 17683254

DOI: [10.1016/j.ejmech.2010.09.034](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2010.09.034)

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/02235234>

Targets for anti-T. cruzi drugs in the post-genomic era (Completo, 2010)

MERLINO, A., CERECETTO, H., GONZÁLEZ, M.

Current enzyme inhibition, v.: 64, p.:195 - 210, 2010

Palabras clave: T. cruzi targets inhibitors medicinal chemistry

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Bentham Science Publishers

ISSN: 15734080

<http://www.bentham.org/cei>

Scopus®

Anti-trypanosomatid benzofuroxans and deoxygenated analogues: Synthesis using polymer-supported triphenylphosphine, biological evaluation and mechanism of action studies (Completo, 2009)

Diego Castro, BOIANI, L., BENÍTEZ, D., HERNÁNDEZ, P., MERLINO, A., GIL, C., OLEA-AZAR, C., GONZÁLEZ, M., CERECETTO, H., PORCAL, W.

European Journal of Medical Chemistry, v.: 44 12, p.:5055 - 5065, 2009

Palabras clave: Mitochondrial dehydrogenases Hybrid benzofuroxans

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Elsevier Masson SAS

ISSN: 02235234

DOI: [10.1016/j.ejmech.2009.09.009](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2009.09.009)

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/02235234>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

o-Nitroanilines as major metabolic products of anti-Trypanosoma cruzi 5-phenylethenylbenzofuroxans in microsomal and cytosolic fractions of rat hepatocytes and in whole parasitic cells (Completo, 2009)

BOIANI, M., MERLINO, A., GERPE, A., PORCAL, W., CROCE, F., DEPAULA, S., RODRÍGUEZ, M.A., CERECETTO, H., GONZÁLEZ, M.

Xenobiótica, v.: 39 3, p.:236 - 248, 2009

Palabras clave: Chagas disease benzofuroxan metabolism rat hepatocytes microsomes rat hepatocytes cytosolic fraction Trypanosoma cruzi

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Taylor & Francis Group, London

ISSN: 00498254

DOI: [10.1080/00498250802691535](https://doi.org/10.1080/00498250802691535)

<http://dx.doi.org/10.1080/00498250802691535>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Second Generation of 2H-benzimidazole 1,3-dioxide derivatives as anti-trypanosomatid agents: Synthesis, biological evaluation, and mode of action studies (Completo, 2009)

BOIANI, M., BOIANI, L., MERLINO, A., HERNÁNDEZ, P., CERECETTO, H., GONZÁLEZ, M.

European Journal of Medicinal Chemistry (electrónico), v.: 44 11, p.:4426 - 4433, 2009

Palabras clave: Chagas disease 2H-Benzimidazole 1,3-dioxide Leishmaniasis Mitochondrial

dehydrogenases

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Elsevier Masson SAS

ISSN: 17683254

DOI: [10.1016/j.ejmech.2009.06.014](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2009.06.014)

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/09680896>

Cytotoxic, mutagenic and genotoxic effects of new anti-T. cruzi 5-phenylethenylbenzofuroxans. Contribution of phase I metabolites on the mutagenicity induction (Completo, 2009)

CABRERA, M., LAVAGGI, M.L., HERNÁNDEZ, P., MERLINO, A., GERPE, A., PORCAL, W., BOIANI, M., FERREIRA, A., MONGE, A., LÓPEZ DE CERAIN, A., GONZÁLEZ, M., CERECETTO, H.

Toxicology Letters, v.: 190 2, p.:140 - 149, 2009

Palabras clave: Metabolism Mutagenicity Genotoxicity

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Elsevier Masson SAS

ISSN: 03784274

DOI: [10.1016/j.toxlet.2009.07.006](https://doi.org/10.1016/j.toxlet.2009.07.006)

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/03784274>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Development of a HPLC method for the determination of antichagasic phenylethenylbenzofuroxans and its major synthetic secondary products in the chemical production processes (Completo, 2008)

MERLINO, A., GERPE, A., BOIANI, M., PORCAL, W., FAGIOLINO, P., GONZÁLEZ, M., CERECETTO, H.

Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis, v.: 47 1, p.:88 - 94, 2008

Palabras clave: HPLC Phenylethenylbenzofuroxans Secondary product Geometric isomers

Benzofurazans

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Analítica /

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Elsevier B.V., Amsterdam

ISSN: 07317085

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/07317085>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Arylethenylbenzofuroxan derivatives as drugs for Chagas disease: Multigram-batch synthesis using Wittig-Boden process (Completo, 2008)

PORCAL, W., MERLINO, A., BOIANI, M., GERPE, A., GONZÁLEZ, M., CERECETTO, H.

Organic process research & development, v.: 12 2, p.:156 - 162, 2008

Palabras clave: Benzofurazans Arylethenylbenzofuroxan Multigram batch synthesis Wittig-Boden conditions

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Scientific Update LLP, UK

ISSN: 10836160

<http://pubs.acs.org/journals/oprdfk/index.html>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

In vivo studies of 5-arylethenylbenzofuroxans in acute murine models of Chagas disease (Completo, 2008)

BOIANI, L., DAVIES, C., ARRENDONDO, C., PORCAL, W., MERLINO, A., GERPE, A., BOIANI, M., PACHECO, J.P., BASOMBRÍO, M.Á., CERECETTO, H., GONZÁLEZ, M.

European Journal of Medicinal Chemistry (electrónico), v.: 43 10, p.:2229 - 2237, 2008

Palabras clave: Arylethenylbenzofuroxan Chagas In vivo studies

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: Elsevier Masson SAS

ISSN: 17683254

DOI: [10.1016/j.ejmech.2007.12.016](https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2007.12.016)

2-Benzyl-2H-Benzimidazole 1,3-Dioxide Derivatives: A Spectroscopic and Theoretical Study (Completo, 2007)

MERLINO, A. , BOIANI, M. , GONZÁLEZ, M. , CERECETTO, H.
Spectrochimica acta. Part A, Molecular and biomolecular spectroscopy, v.: 67 2 , p.:540 - 549, 2007
Palabras clave: 2-Benzyl-2-methyl-2H-benzimidazole 1,3-dioxide DFT calculations Electronic spectra NMR spectra IR spectra Mass spectrometry
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Caracterización espectroscópica
Medio de divulgación: Internet
Lugar de publicación: Elsevier B.V., Amsterdam
ISSN: 13861425
<http://www.sciencedirect.com/science/journal/13861425>
Scopus' WEB OF SCIENCE™

Second Generation of 5-Ethenylbenzofuroxan Derivatives as Inhibitors of Trypanosoma Cruzi Growth: Synthesis, Biological Evaluation and Structure Activity Relationships (Completo, 2007)

MERLINO, A. , PORCAL, W. , HERNÁNDEZ, P. , AGUIRRE, G. , BOIANI, L. , BOIANI, M. , FERREIRA, A. , DI MAIO, R. , CASTRO, A. , GONZÁLEZ, M. , CERECETTO, H.
Bioorganic & Medicinal Chemistry, v.: 15 7 , p.:2768 - 2781, 2007
Palabras clave: Ethenylbenzofuroxans Wittig reaction T. cruzi
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Médica
Medio de divulgación: Internet
Lugar de publicación: Elsevier B.V., Amsterdam
ISSN: 09680896
<http://www.sciencedirect.com/science/journal/09680896>
Scopus' WEB OF SCIENCE™

One pot synthesis of benzyltriphenylphosphonium acetates from the corresponding activated benzylic alcohols (Completo, 2006)

HERNÁNDEZ, P. , MERLINO, A. , GERPE, A. , PORCAL, W. , PIRO, O.E. , GONZÁLEZ, M. , CERECETTO, H.
Arkivoc, v.: 2006 11 , p.:128 - 136, 2006
Palabras clave: Wittig reaction Phosphonium acetates benzyl alcohols
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica /
Medio de divulgación: Internet
Lugar de publicación: ARKAT, USA
ISSN: 14246376
<http://www.arkat-usa.org>
Scopus'

NO ARBITRADOS

Insight into the mechanism of action and selectivity of caspase-3 reversible inhibitors through in silico studies (Completo, 2017)

MININI, L. , FERRARO, F. , CANCELA, S. , MERLINO, A.
Journal of Molecular Structure, v.: 1147 p.:558 - 568, 2017
Palabras clave: molecular docking Rational drug design Alzheimers Disease caspase-3 inhibitors MD simulations
Medio de divulgación: Internet
ISSN: 00222860

Expanding the family of heteroleptic oxidovanadium(IV) compounds with salicylaldehyde semicarbazones and polypyridyl ligands showing anti-Trypanosoma cruzi activity (Completo, 2015)

SCALESE, G. , BENÍTEZ, J. , ROSTÁN, S. , CORREIA, I. , BRADFORD, L. , VIEITES, M. , MININI, L. , MERLINO, A. , COITIÑO, E.L. , BIRRIEL, E. , VARELA, J. , CERECETTO, H. , GONZÁLEZ, M. , COSTA, J. , GAMBINO, D.
Journal of Inorganic Biochemistry, v.: 147 p.:116 - 125, 2015
Medio de divulgación: Internet

TEXTOS EN PERIÓDICOS O REVISTAS

Impacto sensorial del procesamiento de la yerba mate sobre la composición volátil (2007)

Asociación de Química y Farmacia del Uruguay v: 51, 29, 35

Revista

MERLINO, A. , MARTÍNEZ, N. , LORENZO, D , MÁRQUEZ, V. , VÁZQUEZ, A. , CESIO, V. , HEINZEN, H. , DELLACASSA, E.

Palabras clave: compuestos volátiles en yerba mate cromatografía gaseosa espectrometría de masas

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Uruguay

Producción técnica

PRODUCTOS

Naftilchalconas para el control de fascioliasis y otras trematodiasis mediante inhibición de catepsinas L (2016)

Prototipo, Fármacos y similares

CORVO, I. , CABRERA, M , FERRARO, F. , MERLINO, A. , GONZÁLEZ, M. , CERECETTO, H. , TORT, J

Patente de Invención

País: Uruguay

Disponibilidad: Restringida

Medio de divulgación: Papel

Presentada ante la DNPI el 14/12/2016

Derivados de 1,3-dióxido de benzimidazol. Procedimiento de preparación y utilización (2005)

Prototipo, Fármacos y similares

MERLINO, A. , CERECETTO, H. , GONZÁLEZ, M. , BOIANI, M.

País: Uruguay

Disponibilidad: Restringida

Patente o Registro:

Patente de invención

UR 29076, Derivados de 1,3-dióxido de benzimidazol

Depósito: 01/07/2005; Examen: ; Concesión:

Patente nacional: SI

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Otros

Evaluaciones

EVALUACIÓN DE PROYECTOS

EVALUACIÓN INDEPENDIENTE DE PROYECTOS

ANII (2014/2014)

Uruguay

ANII

Cantidad: Menos de 5

Evaluación de 3 proyectos para becas de posgrado nacionales

EVALUACIÓN DE PUBLICACIONES

REVISIONES

Current Drug Discovery Technologies (2017)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5

Theoretical Biology and Medical Modelling (2015)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Revisión del artículo "Identification of drug target and drug template of Enzyme- inhibitor complex by Trifluoperazine on Trypanothione reductase to control Chagas disease"

Journal of Molecular Modeling (2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Revisión del artículo "Molecular modeling and simulation of human eNOS reductase domain, an enzyme involved in release of vascular Nitric Oxide"

SpringerPlus (2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Revisión del artículo "INTERACTIONS OF ANTIPARASITIC STEROLS WITH STEROL 14A-DEMETHYLASE (CYP51) OF HUMAN PATHOGENS"

Arabian Journal of Chemistry (2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
Revisión del artículo "Novel 2,5-Disubstituted-1,3,4-Oxadiazole Derivatives Induce Apoptosis in HepG2 Cells Through p53 Mediated Intrinsic Pathway"

Journal of Biological Chemistry (2014)

Tipo de publicación: Revista
Cantidad: Menos de 5
A solicitud de la Dra. Beatriz Álvarez colaboré en la revisión del artículo "Identification of small molecule inhibitors of type III secretion system ATPase EscN from enteropathogenic E. coli"

EVALUACIÓN DE CONVOCATORIAS CONCURSABLES

Llamados Grado 1 efectivos e interinos (2013 / 2017)

Comité evaluador
Uruguay
Cantidad: De 5 a 20
Facultad de Ciencias

Formación de RRHH

TUTORÍAS CONCLUIDAS

POSGRADO

Diseño racional, síntesis y estudio del mecanismo de acción de inhibidores reversibles de caspasa-3 como potenciales fármacos frente a la enfermedad de Alzheimer (2013)

Tesis de maestría
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay
Programa: Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad
Nombre del orientado: Lucía Minini
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Areas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal
Realizó pasaje a doctorado en diciembre 2015

GRADO

Estudio de nitronas como inhibidores de apoptosis mediada por caspasa-3 (2015)

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Programa: Licenciatura en Bioquímica
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad
Nombre del orientado: Saira Cancela
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: inhibidores de caspasa-3 moduladores de apoptosis caspasa-3 nitronas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

OTRAS

Estudio del mecanismo de inhibición de la activación de caspasa-3 por nitronas (2014)

Iniciación a la investigación
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Saira Cancela
País/Idioma: Uruguay, Español
Co-tutora: Paola Hernández, Laboratorio de Epigenética e Inestabilidad Genómica, IIBCE

Diseño racional asistidos por computadora de inhibidores selectivos de caspasa-3 humana (2013)

Otras tutorías/orientaciones
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Nombre del orientado: Florencia Ferraro
País/Idioma: Uruguay, Español
Áreas de conocimiento:
Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

Diseño racional asistidos por computadora de inhibidores selectivos de caspasa-3 humana (2013)

Otras tutorías/orientaciones
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Nombre del orientado: Saira Cancela
País/Idioma: Uruguay, Español
Áreas de conocimiento:
Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

Estudios teóricos del efecto de mutaciones en la enzima VHL y su interacción con HIF-1 y elonguina B y C (2013)

Otras tutorías/orientaciones
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Nombre del orientado: Cecilia Mathó
País/Idioma: Uruguay, Español
Áreas de conocimiento:
Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal
La estudiante Cecilia Mathó que se encuentra realizando su Tesis de Doctorado en Buenos Aires, realizó una pasantía de investigación durante dos semanas (9/22/2013-9/08/2013) en el Laboratorio de Química Teórica y Computacional bajo mi orientación y la de la Dra Coitiño.

Diseño racional y síntesis en fase sólida de bencimidazoles inhibidores de cruzipaina con potencial aplicación

antichagásica (2011)

Iniciación a la investigación

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

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: Natalia Ríos

Medio de divulgación: Otros

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Inhibidores de cruzipaina docking molecular

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química teórica y computacional

Tutor: Dr. Williams Porcal, Laboratorio de Química Orgánica, Grupo de Química Médica, Facultad de Ciencias

Investigación y desarrollo de inhibidores irreversibles de enzimas de T. cruzi (2011)

Iniciación a la investigación

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

Nombre del orientado: Lucía Minini

Medio de divulgación: Otros

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: T. cruzi docking molecular triosafostato isomerasa

Areas de conocimiento:

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

Cotutor: Dr. Hugo Cerecetto, Laboratorio de Química Orgánica, Grupo de Química Médica, Facultad de Ciencias.

Estudio teórico del efecto de mutaciones en la enzima VHL y su interacción con HIF-1 y elonguina B y C (2011)

Otras tutorías/orientaciones

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

Nombre del orientado: Cecilia Mathó

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química computacional

La estudiante Cecilia Mathó que se encuentra realizando su tesis de posgrado en Buenos Aires, realizó una pasantía de investigación durante una semana (8/08/2011-12/08/2011) en el Laboratorio de Química Teórica y Computacional bajo mi orientación y la de la Dra Coitiño.

Purificación y ensayos de actividad de la principal proteasa de T. cruzi, Cruzipaina (2010)

Otras tutorías/orientaciones

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

Nombre del orientado: Natalia Rios

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: T. cruzi Cruzipaina

Areas de conocimiento:

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

Estudio de la relación estructura-actividad biológica de distintos complejos radicalarios de Pt(II)/Pd(II) conteniendo agrupamientos 5-nitrofuriltiosemicarbazona (2010)

Otras tutorías/orientaciones

Sector Educación Superior/Público / / , Uruguay

Nombre del orientado: Lucía Minini

Medio de divulgación: Otros

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: radicales aniónicos complejos de Pt/Pd compuestos anti-T. cruzi

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química teórica y computacional

Proyecto colaborativo con la Dra. Dinorah Gambino, Cátedra de Química Inorgánica, Facultad de

Química. Cotutor: Dra. Laura Coitiño

TUTORÍAS EN MARCHA

POSGRADO

Diseño racional, síntesis y estudio del mecanismo de acción de inhibidores reversibles de caspasa-3 como potenciales fármacos frente a la enfermedad de Alzheimer (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: Lucía Minini

Medio de divulgación: Otros

País/Idioma: Uruguay, Español

Áreas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química

Medicinal

Co-tutoras: Ma Laura Lavaggi y Beatriz Álvarez

Nitronas como potenciales fármacos neuroprotectores para el tratamiento de la Enfermedad de Alzheimer: un abordaje multidisciplinario (2016)

Tesis de maestría

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: Saira Cancela

País/Idioma: Uruguay, Español

Co-tutoras: Paola Hernández y Patricia Lagos

Diseño racional, síntesis y caracterización bio-estructural de derivados de flavonoides inhibidores de catepsinas de Fasciola hepática como potenciales fármacos antihelmínticos (2015)

Tesis de maestría

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

Programa: Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: Florencia Ferraro

País/Idioma: Uruguay, Español

Tutores: Ileana Cabrera e Ileana Corvo

Otros datos relevantes

PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS

Integrante del SNI- Investigador Activo- Nivel I (2014)

(Nacional)

ANII

Investigador Grado 3 (2010)

PEDECIBA QUÍMICA

Integrante del SNI-Candidato a Investigador (2008)

(Nacional)

ANII

PRESENTACIONES EN EVENTOS

CHITEL 2017 (2017)

Congreso

Computational insights on the molecular basis of the inhibition of Prostaglandin Endoperoxide H Synthase 2 (PGHS-2 or COX-2) activity by nitroarachidonate

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Sorbonne Université

Presentación oral. Autores: Alicia Merlino, Lucía Bonilla, Andrés Trostchansky, Lawrence Marnett, Homero Rubbo, Laura Coitiño.

ISQBP President's Meeting 2016 (2016)

Congreso

Molecular level characterization of conformational changes induced by diarylidene ketone inhibitors into Trypanosoma cruzi triosephosphate isomerase through molecular dynamics simulations

Noruega

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 26

Nombre de la institución promotora: University of Bergen

ISQBP President's Meeting 2016 (2016)

Congreso

In silico design, DNA interaction, synthesis and biological evaluation of inhibitors of hypoxia-inducible factor (HIF-1) as antitumor agents

Noruega

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 26

Nombre de la institución promotora: University of Bergen

Presentado por Ma Laura Lavaggi. Autores: Lucía Minini, Maíra De Negri, Alicia Merlino, María Laura Lavaggi

45a Reunião Anual da SBBq (2016)

Congreso

Novel compounds as selective inhibitors of caspase-3: organic synthesis, in silico and in vitro evaluation

Brasil

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 27

Nombre de la institución promotora: Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular

Presentado por Lucía Minini. Autores: Lucía Minini, Paola Hernández, María Laura Lavaggi, Alicia Merlino.

QUITEL 2016 (2016)

Congreso

Molecular Docking and molecular dynamics of DNA with 2,3-amine/hidroxiphenazine 5,10 dioxides: insights into molecular mechanisms for inhibition of DNA recognition by HIF-1 in solid tumors

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 35

Presentado por Lucía Minini. Autores: Lucía Minini, Alicia Merlino, María Laura Lavaggi

QUITEL 2016 (2016)

Congreso

Nitrones as potencial neuroprotective agents for the treatment of Alzheimers disease

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 35

Presentado por Saira Cancela. Autores: Saira Cancela, Paola Hernández, Williams Porcal, Alicia Merlino

QUITEL 2016 (2016)

Congreso

In route to decipher the molecular basis of HAMLETs antitumoral activity: a comparison of alfa-Lactalbumin interactions with oleic and stearic acids

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 35

Presentado por Florencia Ferraro. Autores: Florencia Ferraro, Florencia Klein, Alicia Merlino, Laura Coitiño

QUITEL 2016 (2016)

Congreso

Exploring the nature of the catalytic mechanism of a soluble NADH-dependent Fumarate Reductase from Trypanosoma cruzi

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 35

Presentado por Santiago Sastre. Autores: Santiago Sastre, Alicia Merlino, Laura Coitiño

4th International Conference on Medicinal Chemistry and Computer Aided Drug Designing (2015)

Congreso

Nitrones as potential therapeutic agents against Alzheimer's Disease

Estados Unidos

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 20

Nombre de la institución promotora: OMICS International

9as Jornadas de la SBBM (2015)

Simposio

Estudio de nitronas como inhibidores de apoptosis en células neuronales

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 15

Presentado en forma oral por Saira Cancela. Autores: Saira Cancela, Paola Hernández, Alicia Merlino

23rd International Congress of the IUBMB and 44th Annual Meeting of the Brazilian Society for Biochemistry and Molecular Biology (SBBq) (2015)

Congreso

Evaluation of new potential histone deacetylase-7 inhibitors as sensitizers of tumor cells to chemotherapy

Brasil

Tipo de participación: Poster

23rd International Congress of the IUBMB and 44th Annual Meeting of the Brazilian Society for Biochemistry and Molecular Biology (SBBq) (2015)

Congreso

Nitrones as inhibitors of apoptosis in neuronal cells

Brasil

Tipo de participación: Poster

TheoBio2015 (2015)

Congreso

Toward Selective Caspase-3 Inhibitors Development: Molecular Docking and Molecular Dynamics Simulations of Caspase-3 and Caspase-7

Italia

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 32

Nombre de la institución promotora: Università degli studi di Cagliari

IV LASID (2015)

Congreso

Clustering of immune responses associated with susceptibility or resistance to Echinococcus granulosus through principal components analysis

Argentina

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Sociedad Argentina de Inmunología

Autores: Gustavo Mourglia-Ettlin, Alicia Merlino, Sylvia Dematteis

XV Jornadas de la SUB (2014)

Congreso

Estudio del mecanismo de inhibición de la activación de caspasa-3 por nitronas

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 24

Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Biociencias

XV Jornadas de la SUB (2014)

Congreso

Modelos de la interacción entre el ácido oleico y la α -lactoalbúmina en HAMLET: camino a entender las causas de su actividad antitumoral

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 24

Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Biociencias

XV Jornadas de la SUB (2014)

Congreso

Diseño in silico y síntesis de inhibidores del factor inducible por hipoxia agentes antitumorales.

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 24

Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Biociencias

IV Latin American Meeting on Biological Inorganic Chemistry (2014)

Congreso

Design of Prospective Antiparasitic Oxidovanadium(IV) Compounds: DNA Interaction Studies

Argentina

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: CONICET

WATOC 2014 (2014)

Congreso

Stability and dynamics of VBC-HIF complexes under normoxic and hypoxic conditions

Chile

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Pontificia Universidad Católica de Chile

Modelización computacional de sistemas complejos de interés biológico y biomédico: recorriendo desde su divulgación hasta el conocimiento técnico (2014)

Simposio

Modelado y simulación de la estructura e interacciones en macromoléculas biológicas (adn/proteínas)

Uruguay

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 8

Nombre de la institución promotora: Regional Norte

17º Simpósio Brasileiro de Química Teórica (2013)

Simposio

Insights into the binding mode of 14-NO₂AA to PGHS-1 and PGHS-2: clues from molecular dynamics simulations to propose inhibitory mechanisms

Brasil

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40
Palabras Clave: nitrolipids as PGHSs inhibitors Molecular dynamic simulations
Areas de conocimiento:
Ciencias Médicas y de la Salud / Otras Ciencias Médicas / Otras Ciencias Médicas / Química Medicinal

2da Jornadas +Biofísica (2013)

Congreso
Docking y dinámica molecular aplicados al diseño racional de inhibidores selectivos de caspasa-3
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 26

2da Jornadas +Biofísica (2013)

Congreso
Modelado del dominio central de fumarato reductasas de T. cruzi y L. major: perspectivas para el diseño de inhibidores
Uruguay
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 26

2da Jornadas +Biofísica (2013)

Congreso
Estabilidad y dinámica de los complejos VBC-HIF-1 α en condiciones de normoxia e hipoxia
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 26

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

Congreso
Boronated derivatives of coumarin as novel probes for peroxynitrite detection
Argentina
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 38
Nombre de la institución promotora: Universidad de Buenos Aires

XIX Simposio Nacional de Química Orgánica (2013)

Congreso
Diseño, modelado y síntesis de profármacos inhibidores de la acción de HIF-1 con afinidad por la secuencia HRE
Argentina
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 35
Nombre de la institución promotora: Sociedad Argentina de Investigación en Química Orgánica

QUITEL 2012 (2012)

Congreso
Molecular Dynamics simulations of Trypanosoma cruzi triosephosphate isomerase inhibitors: Insights into the inhibition mechanism and selectivity
Brasil
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40

XIV Jornadas de la SUB (2012)

Congreso
Diseño racional de inhibidores selectivos de enzimas esenciales para la vida del parásito Trypanosoma cruzi
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 28
Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Biociencias

XIV Jornadas de la SUB (2012)

Congreso
Interacción de la enzima ciclooxigenasa con ácido nitroaraquidónico: Rol de la His388
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 28
Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Biociencias

XIV Jornadas de la SUB (2012)

Congreso
Modelado por homología de la enzima Fumarato Reductasa de Trypanosoma cruzi y Leishmania major. Estudio de la capacidad inhibitoria de complejos metálicos mediante docking molecular
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 28
Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Biociencias

XIV Jornadas de la SUB (2012)

Congreso
Análisis de la interacción nitrolípidos-PPARgamma: un enfoque molecular preliminar
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 28
Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Biociencias

6th Brazilian Symposium of Medicinal Chemistry (2012)

Congreso
Rational design and solid-phase synthesis of novel benzimidazole derivatives as potential cruzipain inhibitors
Brasil
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 30

Quantum Bioinorganic Chemistry 3 (2011)

Congreso
Unraveling the mechanism of action of bioactive Pt/Pd-thiosemicarbazone complexes with the aid of conceptual DFT and Fukui indexes
República Checa
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 20

ENAQUI (2011)

Congreso
Diseño racional de inhibidores selectivos para la enzima triosafosfato isomerasa de Trypanosoma cruzi.
República Checa
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 20
Nombre de la institución promotora: PEDECIBA-Química

XL Reunión anual de la SBBq (2011)

Congreso
Molecular docking studies and binding mode prediction of novel T. cruzi triosephosphate isomerase inhibitors
Brasil
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 32
Nombre de la institución promotora: SBBq
Palabras Clave: molecular docking T. cruzi TIM inhibitors
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática

IX Girona Seminar on Electron Density, Density Matrices, and Density Functional Theory (2010)

Seminario

DFT and Data Mining characterization of a series of Pt(IV) prospective anticancer agents and their Pt(II) metabolites

España

Tipo de participación: Poster

EFMC-ISMC 2010. 21st International Symposium on Medicinal Chemistry (2010)

Congreso

Guanidine containing benzofuroxan and benzimidazole 1,3-dioxide scaffolds as cruzipain-T. cruzi inhibitors

Bélgica

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 29

Nombre de la institución promotora: Koninklijke Vlaamse Chemische Vereniging/Société Royale de Chimie

Palabras Clave: guanidine-pharmacophore Cruzipain-T. cruzi docking and NMR

Foro de Innovaciones en Educación Superior (2010)

Simposio

Fomentando la metacognición y el desarrollo de pensamiento autónomo y crítico desde ambientes de aprendizaje cooperativo/colaborativo en Físicoquímica Moderna

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 24

Nombre de la institución promotora: Comisión Sectorial de Enseñanza-UdelaR

1st International Conference on Bioinformatics SolBio 2010 (2010)

Congreso

Insights into the mechanism of binding of nitro fatty acids to mammalian COX-2.

Chile

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 35

Nombre de la institución promotora: Sociedad Iberoamericana de Bioinformática/Centro de Bioinformática y Simulación Molecular (Univ. Talca, Chile)

Palabras Clave: docking cyclooxygenase nitroarachidonate

Áreas de conocimiento:

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

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

Información y Bioinformática / Bioinformática Estructural

XIII Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias (2010)

Congreso

Derivados de benzofuroxano y 1,3-dióxido de benzimidazol conteniendo agrupamientos arilguanidina como inhibidores de cruzipaina

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 35

Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Biociencias

Palabras Clave: Cruzipaina arilguanidinas bioinformática

Áreas de conocimiento:

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

Primer Encuentro Nacional de Ciencias Químicas (2009)

Encuentro

Benzofuroxanos y di-N-óxidos de benzimidazol con actividad antichagásica: estudio como inhibidores de cruzipaina

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 21

Nombre de la institución promotora: PEDECIBA Química

Palabras Clave: compuestos híbridos Cruzipaina docking

Singularidades del compuesto antitumoral oxaliplatino evidenciadas por comparación del potencial electrostático 3D (2009)

Encuentro
Singularidades del compuesto antitumoral oxaliplatino evidenciadas por comparación del potencial electrostático 3D
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Nombre de la institución promotora: SBBM
Palabras Clave: oxaliplatino
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica

3er Workshop Argentino de Química Medicinal (2008)

Congreso
Utilización de un sencillo método de docking para predecir la capacidad de inhibición de cruzipaina de una serie de derivados de benzofuroxano
Argentina
Tipo de participación: Poster
Palabras Clave: Cruzipaina derivados de benzofuroxano docking

XV Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica (2007)

Congreso
Síntesis y evaluación biológica de compuestos híbridos derivados del sistema benzofuroxano y 1,3-dióxido de benzimidazol
España
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 6
Nombre de la institución promotora: Sociedad Española de Química Terapéutica
Palabras Clave: compuestos híbridos benzofuroxano 1,3-dióxido de benzimidazol
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Médica

XV Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica (2007)

Congreso
Escalado de 5-(feniletetil)benzofuroxanos con actividad antichagásica
España
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 6
Nombre de la institución promotora: Sociedad Española de Química Terapéutica
Palabras Clave: feniletetilbenzofuroxanos Escalado
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica

IX Simposio Argentino y XII Simposio Americano de Farmacobotánica (2007)

Congreso
Composición volátil de la yerba mate, impacto sensorial del proceso de elaboración
Argentina
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 6
Nombre de la institución promotora: Universidad Nacional de Tucumán, Fundación Miguel Lillo y Secretaría de Desarrollo e Innovación
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química de Productos Naturales

5th Joint Meeting on Medicinal Chemistry (2007)

Congreso
Preclinical development of antichagasic benzofuroxans
Eslovenia
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 6
Nombre de la institución promotora: Faculty of Pharmacy, University of Ljubljana
Áreas de conocimiento:

11th Nuclear Magnetic Resonance Users Meeting (2007)

Congreso

Quantitative Structure-Activity Relationship Studies Using Extracted Parameters from the NMR Experiment

Brasil

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 8

5th Joint Meeting on Medicinal Chemistry (2007)

Congreso

Ethenylbenzofuroxans actives against T. cruzi: in vitro and in vivo studies

Eslovenia

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 6

Nombre de la institución promotora: Faculty of Pharmacy, University of Ljubljana

Areas de conocimiento:

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

Seminarios del Laboratorio de Química Orgánica (2007)

Seminario

Investigación y desarrollo de nuevos fármacos anti T. Cruzi: Inhibidores de cruzaina derivados del sistema benzofuroxano y 1,3-dióxido de benzimidazol

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

XV Congreso de la Sociedad Española de Química Terapéutica (2007)

Congreso

Estudios de metabolización de agentes antichagásicos derivados de 5-(feniletetil)benzofuroxanos

España

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 6

Nombre de la institución promotora: Sociedad Española de Química Terapéutica

Palabras Clave: 5-(feniletetil)benzofuroxanos metabolización

Areas de conocimiento:

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

3rd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry (2006)

Congreso

Synthesis and biological evaluation of heterocyclic hybrid compounds containing hydrazone/thiosemicarbazone and N-oxide moieties

Brasil

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 8

Nombre de la institución promotora: Universidad de San Pablo

Areas de conocimiento:

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

Escuela de Invierno Giambiagi: Clusters, Molecules, Biomolecules and Materials (2006)

Congreso

2-Benzyl-2H-Benzimidazole 1,3-Dioxide Derivatives: A Spectroscopic and Theoretical Study

Argentina

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 8

Nombre de la institución promotora: Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Areas de conocimiento:

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

Conference on Drug Development for Third World Diseases (2006)

Congreso

Tuning the electron structure of [Ru(L)2dppz]2+ DNA damage probes by environment: a DFT-PCM Study

Italia

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 8

Nombre de la institución promotora: International Centre for Theoretical Physics

Áreas de conocimiento:

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

XIV Jornadas de Jóvenes Investigadores de la AUGM (2006)

Encuentro

Síntesis, Caracterización Espectroscópica y Evaluación Biológica de Derivados de 1,3-Dióxido de 2H-Benzimidazol

Brasil

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 8

Nombre de la institución promotora: Universidad de Campinas

XI Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias (2005)

Congreso

Síntesis y evaluación biológica de derivados de 1,3-dióxido de 2H-benzimidazol

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 8

Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Biociencias

Áreas de conocimiento:

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

Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular (2004)

Congreso

Nuevos derivados de N-óxido como agentes tripanosomicidas. Generación de radicales libres y efecto sobre la respiración celular parasitaria

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 6

Nombre de la institución promotora: Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular

2nd Brazilian Symposium on Medicinal Chemistry (2004)

Congreso

Synthesis and biological characterisation of Nitroalkenes, Nitroaldols and Nitroalkanes

Brasil

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 8

Nombre de la institución promotora: Universidad Federal de Rio de Janeiro

Áreas de conocimiento:

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

JURADO/INTEGRANTE DE COMISIONES EVALUADORAS DE TRABAJOS ACADÉMICOS

Síntesis y caracterización biológica preliminar de nitrosotio-derivados de α -tocoferol diseñados como potenciales agentes antitumorogénicos (2014)

Candidato: Lorena Téliz

Tipo Jurado: Tesis/Monografía de grado

MERLINO, A.

Licenciatura en Bioquímica / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República /

Facultad de Ciencias - UDeLaR / Uruguay

País: Uruguay

Idioma: Español

Información adicional

Participación en el dictado del curso de Educación Permanente Diseño y Visualización asistida por PC de la estructura 3D de moléculas y macromoléculas, Facultad de Ciencias, Universidad de la

República, Julio de 2004. Actividades de soporte al dictado del curso de Educación Permanente de Química de la Atmósfera y Polución, Facultad de Ciencias, Universidad de la República. Noviembre de 2003. Tareas de soporte en el desarrollo del material para el curso de Ciencias Físico-Químicas de 3er año de Educación Secundaria en el marco del convenio con ANEP obtenido por el Laboratorio de Química Teórica y Computacional de Facultad de Ciencias en 2003. (25/07/2008) (25/07/2008)

Indicadores de producción

PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA	30
Artículos publicados en revistas científicas	29
Completo	29
Textos en periódicos	1
Revistas	1
PRODUCCIÓN TÉCNICA	2
Productos tecnológicos	2
Con registro o patente	1
EVALUACIONES	8
Evaluación de proyectos	1
Evaluación de publicaciones	6
Evaluación de convocatorias concursables	1
FORMACIÓN RRHH	14
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas	11
Otras tutorías/orientaciones	6
Iniciación a la investigación	3
Tesis de maestría	1
Tesis/Monografía de grado	1
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha	3
Tesis de maestría	2
Tesis de doctorado	1