



ELENA LAURA COITIÑO
IZAGUIRE

Dra.

laurac@fcien.edu.uy
lqtc.fcien.edu.uy

Laboratorio de Química Teórica y Computacional,
Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, UdeLaR. Iguá 4225 eq. Mataojo, Montevideo 11400, Uruguay
y
25252186

SNI

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

Fecha de publicación: 29/09/2018
Última actualización SNI: 29/09/2018

Datos Generales

INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Universidad de la República/ Facultad de Ciencias - UDeLaR/ Lab. de Quím. Teórica y Computacional, Instituto de Quím. Biológica / Uruguay

DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR / Sector Educación Superior/Público
/ Laboratorio de Química Teórica y Computacional, Instituto de Química Biológica
Dirección: LQTC-IQB, Facultad de Ciencias-UdeLaR, Iguá 4225, esq. Mataojo / 11400 / Montevideo, Uruguay
Teléfono: (598) 25252186
Correo electrónico/Sitio Web: laurac@fcien.edu.uy <http://lqtc.fcien.edu.uy> <http://www.fcien.edu.uy> <http://iqb.fcien.edu.uy>

Formación

Formación académica

CONCLUIDA

DOCTORADO

Dottorato di Ricerche in Scienze Chimiche (1991 - 1994)

Universita degli Studi - Pisa, Italia
Título de la disertación/tesis: Analisi dell'effetto del solvente su processi chimici coinvolgenti le trasformazioni di gruppi aldeidici. Estensioni del modello del continuo polarizzabile (PCM)
Tutor/es: Jacopo Tomasi
Obtención del título: 1995
Institución financiadora: Comunidad Económica Europea
Palabras Clave: modelado de procesos reactivos en fase condensada modelo continuo PCM de solvente aldehidos y oxoaldehidos
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional, Bioinformática Estructural

MAESTRÍA

Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA) (1988 - 1991)

Universidad de la República - Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay
Título de la disertación/tesis: Estudio Teórico del Efecto del Agua sobre las Reacciones de Condensación Aldólica del Acetaldehído
Tutor/es: Oscar N. Ventura
Obtención del título: 1991
Palabras Clave: modelado mecanismos métodos cuánticos catálisis bifuncional por agua
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Cuántica, Físicoquímica Orgánica

GRADO

Bachiller en Química (1983 - 1985)

Universidad de la República - Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay
Título de la disertación/tesis: No corresponde
Tutor/es: No corresponde

Obtención del título: 1988
Palabras Clave: Química fundamental
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Fundamental

Formación complementaria

CONCLUIDA

POSDOCTORADOS

Minnesota Supercomputer Institute International Scholar - Institute of Technology - Dept. of Chemistry (1995 - 1997)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / University of Minnesota , Estados Unidos
Palabras Clave: métodos híbridos IMOMO Teoría Variacional del Estado de Transición modelado cinético procesos cont. atmosférica
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Fundamental

CURSOS DE CORTA DURACIÓN

Motivación en el aula universitaria (01/2003 - 01/2003)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ingeniería - UDeLaR , Uruguay
36 horas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Modelos pedagógicos, motivación en el aprendizaje

Curso de Diseño de Materiales Educativos para entornos virtuales (01/2003 - 01/2003)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Comisión Sectorial de Enseñanza - UDeLaR , Uruguay
24 horas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Educación a distancia, materiales

Evaluación de Aprendizajes (01/2002 - 01/2002)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Comisión Sectorial de Enseñanza - UDeLaR , Uruguay
16 horas
Palabras Clave: Evaluación Aprendizaje (Camiloni)
Áreas de conocimiento:
Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Evaluación del aprendizaje

Educación a Distancia; Metodología Pedagógica, Medios Técnicos y Tutorías (01/2001 - 01/2001)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Comisión Sectorial de Enseñanza - UDeLaR , Uruguay
24 horas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Educación a distancia, tutorías

Comunicación en el Aula Universitaria (01/2001 - 01/2001)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Comisión Sectorial de Enseñanza - UDeLaR , Uruguay
24 horas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / comunicación en la enseñanza y aprendizaje

Metodología Pedagógica y Campus Digital para la Educación Semipresencial y a Distancia (01/2001 - 01/2001)

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Comisión Sectorial de Enseñanza - UDeLaR, Uruguay

24 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Educación Semipresencial y a distancia

Desarrollo de Material multimedia Interactivo de Apoyo a la Docencia (01/1997 - 01/1997)

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

40 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Informática Educativa

Cray T3D Tutorial: Introduction to MPI - Minnesota Supercomputer Institute (01/1996 - 01/1996)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Minnesota Supercomputer Institute, University of Minnesota, Estados Unidos, Estados Unidos

30 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Cálculo Paralelo de alta performance

Teoría de los Funcionales de la Densidad -Universidad de Pisa, Enrico Clementi - Darío Estrín (01/1993 - 01/1993)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Università degli Studi di Pisa, Pisa, Italia

15 horas

Áreas de conocimiento:

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

Seminario Nazionale di Chimica Fisica 1993 - Metodos Químico Físicos para el estudio de la catálisis (01/1993 - 01/1993)

Sector Extranjero/Internacional/Enseñanza superior / Università degli Studi di Torino, Italia
Palabras Clave: Catálisis Métodos teóricos y experimentales

Áreas de conocimiento:

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

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

Introducción al Sistema Operativo VMS 5.2 - Instituto de Computación - Univ. Autónoma Barcelona (01/1990 - 01/1990)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Autónoma de Barcelona, España

28 horas

Áreas de conocimiento:

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

Métodos Teóricos en Química Organometálica- Agustí Lledós (01/1989 - 01/1989)

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

10 horas

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado Quím. Organometálica

VI Escuela Latinoamericana de Química Teórica - Río de Janeiro (01/1988 - 01/1988)

Sector Extranjero/Internacional/Enseñanza superior / Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Brasil

40 horas

Palabras Clave: Química Teórica

Áreas de conocimiento:

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

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

Escuela de Verano de Química Teórica - Curso Avanzado de Química Teórica - INIFTA - Universidad de La Plata, Argentina (01/1987 - 01/1987)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Argentina

40 horas

Áreas de conocimiento:

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

Escuela de Verano de Química Teórica - Fotoquímica - INIFTA - Universidad de La Plata, Argentina (01/1987 - 01/1987)

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas, Argentina

40 horas

Áreas de conocimiento:

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

PARTICIPACIÓN EN EVENTOS

Curso OEA-Intel - Enfoque de Aprendizaje Basado en Proyectos (8 semanas, a distancia) (2012)

Tipo: Otro

Institución organizadora: Organización de los Estados Americanos (OEA)-Intel, Estados Unidos

Palabras Clave: Aprendizaje por proyectos Plataformas Moodle

Áreas de conocimiento:

Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General /

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / TICs en la educación

Curso OEA-Cát. UNESCO-FLACSO: Ciencia, Tecnología y Sociedad: aportes desde el enfoque de género (120 hs, a distancia) (2005)

Tipo: Otro

Institución organizadora: INEAM-OEA, Cátedra UNESCO Mujer Ciencia y Tecnología-FLACSO, Estados Unidos

Áreas de conocimiento:

Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Enfoque CTS y género

Nuevas Técnicas de Enseñanza e Innovación Pedagógica (1997)

Tipo: Seminario

Institución organizadora: Cátedra UNESCO - AUGM - UDELAR, Uruguay

Pasantía NRC-Canada, entrenamiento en Espectroscopía FT-IR(5 semanas) (1988)

Tipo: Otro

Institución organizadora: FTIR Spectroscopy Lab., Division of Chemistry, NRC, Ottawa, Canadá

Áreas de conocimiento:

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

Pasantía FCEN-UBA entrenamiento en Espectroscopía RMN(6 semanas) (1987)

Tipo: Otro

Institución organizadora: Laboratorio de RMN, FCEN, Universidad de Buenos Aires, Argentina

Áreas de conocimiento:

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

Idiomas

Inglés

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

Italiano

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

Francés

Entiende regular / Habla regular / Lee bien / Escribe regular

Portugués

Entiende bien / Habla regular / Lee 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 /Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica /Química Teórica y Computacional, Bioinformática Estructural

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias de la Computación e Información /Ciencias de la Información y Bioinformática /bioinformática estructural

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente /Meteorología y Ciencias Atmosféricas /Química de la Atmósfera y su contaminación

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Biológicas/Bioquímica y Biología Molecular /Bioquímica computacional

CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Ciencias Biológicas/Biofísica /Biofísica Computacional

Actuación profesional

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

Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (10/2015 - a la fecha)

Investigador Primer Nivel Gr.4, área Química ,40 horas semanales / Dedicación total

Otro (01/1994 - 01/2005)

Investigador Primer Nivel, Gr.5 área Química ,40 horas semanales / Dedicación total

Otro (09/1991 - 01/1994)

Investigador Gr.3 del área Química ,30 horas semanales

Becario (09/1988 - 08/1991)

Becario de posgrado (eq. Gr.2, 30 hs), 1er Ge ,40 horas semanales

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

Facultad de Ciencias - UDeLaR

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (10/1997 - a la fecha)

Profesor de Química Teórica y Computacional ,40 horas semanales / Dedicación total
Según la constitución del equipo docente de base es usual desarrollar una carga horaria semanal cercana a las 60 hs.

Escalafón: Docente

Grado: Grado 4

Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (09/2012 - 12/2016)

Directora del Instituto de Química Biológica ,5 horas semanales / Dedicación total
Cuatro años de labor de dirección consecutivos; corresponden a dos periodos bianuales reglamentarios con renovación por elección

Escalafón: Docente

Grado: Grado 4

Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (03/2001 - 03/2003)

Directora del Instituto de Química Biológica ,5 horas semanales / Dedicación total

Escalafón: Docente

Grado: Grado 4

Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (04/1997 - 10/1997)

Prof. Adj. Química Teórica y Computacional ,40 horas semanales

Contratación por art.9 en tanto se procesaba el concurso para el puesto de Prof. Agregado, Gr.4 de la misma disciplina

Escalafón: Docente

Grado: Grado 3

Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (05/1993 - 10/1997)

Asistente Quím. Teórica & Computacional- Apar ,30 horas semanales

Ingreso por concurso de méritos y pruebas en 1993. Abril.octubre 1997 apartamiento de carrera en el cargo efectivo por asumir un contrato interino de Prof. Adjunto de Química Teórica y Computacional para hacerme cargo de instalar el Laboratorio de Química Teórica y Computacional y conducirlo. Renuncia antes del vencimiento al asumir por concurso el cargo de Profesora Agregada de la misma unidad en octubre 1997.

Escalafón: Docente

Grado: Grado 2

Cargo: Efectivo

Funcionario/Empleado (04/1995 - 10/1996)

Prof. Adjunto de Quím. Teórica&Computacional ,40 horas semanales / Dedicación total

Beca de retorno CSIC-UDELAR al culminar el Ph.D. en Italia, correspondiente a la diferencia de sueldo entre Gr.2, 30 hs y Gr.3, 40 hs. Nota: El programa de trabajo previsto fue cubierto en régimen de dedicación extraordinaria en 6 meses, previo al inicio de postdoctorado en USA

Escalafón: Docente

Grado: Grado 3

Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (08/1991 - 07/1993)

Asistente de Química Teórica y Computacional ,30 horas semanales

Ingreso por concurso de méritos, prorrogada por un período reglamentario de un año hasta concursar por méritos y pruebas por la efectividad en el cargo.

Escalafón: Docente

Grado: Grado 2

Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (12/1990 - 09/1991)

Asistente Académico del Decano ,30 horas semanales

Asistente Académico del Decano de Facultad de Ciencias(FC-UdelaR), Dr. Mario Wschebor

Trabajé en la instalación de la Facultad de Ciencias, proponiendo desarrollar el primer anuario 1991 de la institución, estando a cargo la coordinación de la tarea. Trabajé en el desarrollo de la proyección de la inserción de los egresados de la FC-UdelaR solicitado para la concesión del préstamo del BID obtenido para la instalación de la Facultad. Trabajé en el establecimiento de un Instituto de Química de FC como iniciativa compartida junto con la Facultad de Química-UdelaR.

Escalafón: Docente

Grado: Grado 5

Cargo: Interino

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Estudio del Mecanismo de acción del Cisplatín y Proposición de Nuevos Análogos como Agentes Quimioterapéuticos para Cáncer. (03/1999 - a la fecha)

Esta es la primera línea de investigación especialmente diseñada y montada por quien escribe para el contexto de formación de recursos humanos para la investigación de perfil bioquímico, ante la incorporación del LQTC al Instituto de Química Biológica de la Facultad de Ciencias creado en 1999, dando espacio para el desarrollo de dos tesinas de graduación y una tesis de posgrado a nivel de Maestría y Doctorado. La misma se orientó a modelar los procesos químicos de transformación en el organismo de compuestos de Pt(II/IV)/Pd(II) con acción quimioterapéutica y el screening in silico de potenciales agentes con mejor perfil farmacológico, con especial énfasis puesto hacia el tratamiento del cáncer en interacción con el ADN. A partir de 2010 se ha comenzado a explorar a partir del screening in silico la posible actividad antichagásica de compuestos cuadrado planos, vertiente que se está desarrollando en cooperación con la Dra. Dinorah Gambino de la Facultad de Química de la UdelaR.

Mixta

4 horas semanales

Facultad de Ciencias, Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC) , Coordinador o Responsable

Equipo: PABLO D. DANS , A. MERLINO , A. PITTINI , STEPHANIE PORTILLO , K. CAL , L. MININI

Palabras clave: Anticancerígenos Pt/PD

Áreas de conocimiento:

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

Influencia del entorno fisicoquímico sobre la estructura electrónica y reactividad de bases de ADN: hacia el diseño racional de sondas de Ru(II) para diagnóstico y fármacos para quimioterapia altamente selectivos (03/2001 - a la fecha)

Segunda línea diseñada y montada por quien escribe para el LQTC en el contexto del Instituto de Química Biológica y dirigida a la formación de recursos humanos en el área bioquímica. En la misma se desarrolló una tesina de graduación, y numerosas pasantías por proyecto. Contiene dos componentes principales: a) modelado de los efectos del entorno local (secuencia y medio) en la reactividad de nucleobases de ADN. b) caracterización de la estructura y propiedades fotofísicas de compuestos octaédricos de $[Ru(II)dppzL_2]^{2+}$ capaces de actuar como sensores de daño precoz de ADN y sus interacciones con secuencias representativas. Actualmente se coopera con el Prof. A. Romerosa (España) y la Prof. D. Gambino (Facultad de Química) en esta temática. También se cooperó entre 2011 y 2014 con la Prof. G. Cárdenas-Girón. Se ha incorporado también un complemento incorporando el estudio de compuestos de vanadio. En estos momentos se desarrolla una tesis doctoral en el área.

Mixta

4 horas semanales

Facultad de Ciencias, Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC) , Coordinador o Responsable

Equipo: A. MERLINO , G. MOURGLIA , M. MACHADO , L. DARRÉ , A. CASTRO , G. ARRAMBIDE

Áreas de conocimiento:

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

Modelado de la Nitración de ácidos grasos y sus interacciones con el medio y proteínas relevantes a nivel fisiológico. (03/2010 - a la fecha)

Esta línea nace como corolario al proyecto CSIC de formento a las capacidades de investigación en estudiantes de grado ("Abordaje multidisciplinario de problemas en Ciencias de la Vida")

desarrollado entre 2009 y 2010. La misma fue planteada como colaboración con el grupo experimental del Dr. Homero Rubbo y en este momento aborda la caracterización fisicoquímica del efecto de la nitración sobre la estabilidad, reactividad y capacidad de interactuar no covalentemente de los ácidos grasos oleico, linoleico, linoleico conjugado y araquidónico y la influencia del entorno sobre esas propiedades). Particular énfasis se está poniendo en las interacciones del ácido araquidónico con las proteínas PGHS-1/-2 y en las interacciones de toda la serie con el receptor nuclear PPARγ y pronto se incorporarán interacciones con FABP4 (trabajo en cooperación con la Dra. Ana Ferreira). En estos casos es central la reactividad de estos compuestos con tioles. Se ha desarrollado ya una tesina en el área (2014) y está en curso una segunda (2016).

Fundamental

2 horas semanales

Facultad de Ciencias & Facultad de Medicina, UDELAR, Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC) & Depto de Bioquímica, Coordinador o Responsable

Equipo: A. MERLINO, STEPHANIE PORTILLO, H. RUBBO, A. TROTSCHANSKY, V. VEROLI, A. CANTOU

Áreas de conocimiento:

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

Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica, Ácidos Grasos, Nitración

Modelado de reacciones de glicación de aminas biológicas de relevancia fisiológica en condiciones normales y patológicas (Alzheimer, Diabetes y Cáncer) y su sinergia con la oxidación (03/2002 - a la fecha)

Esta línea de investigación es la tercera armada por quien escribe para el contexto bioquímico/biomédico. Está orientada a caracterizar el mecanismo detallado de procesos de glicación de aminas de relevancia fisiológica para identificar blancos para el desarrollo de nuevos fármacos y el impacto de la glicación en las aminas. En su contexto se desarrollaron 4 tesinas de graduación de bioquímica completas (mecanismo básico de aminas con oxoaldehídos como MG; glicación de beta-amiloide, glicación de histona H1 y glicación de HSA) y se inició en 2015 un posgrado, interrumpido en 2016. Otros dos posgrados en curso a nivel doctoral incluyen el estudio de la glicación de proteínas centrales (HSA y Prx6) en sinergia con la oxidación de tioles.

Fundamental

2 horas semanales

Facultad de Ciencias, Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC), Coordinador o Responsable

Equipo: V. LEONE, T. MEIRELLES, S. PORTILLO, F. KLEIN, J. BONANATA, F. ORTIZ

Palabras clave: Glicación modelado DFT-PCMMecanismos de reacción y papel del agua

Áreas de conocimiento:

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

Modelado de la Estabilidad y Reactividad de cationes radicales distónicos de interés general y biológico (incluye radicales proteicos) (07/1997 - a la fecha)

Esta línea fue la primera elaborada como investigador independiente, presentada a convocatoria concursable nacional (CSE-UdelaR) que obtuvo apoyo. Inicialmente dirigida a caracterizar cationes radicales distónicos derivados de aldehídos y alcoholes, sentó la bases para su posterior extensión al contexto bioquímico de reacciones en enzimas que involucran la generación de radicales distónicos en sus procesos, en particular centrándose la atención en la Etanolamina Amonio Liasa. La línea dio encuadre al desarrollo de una monografía de graduación en 2002, al trabajo de un Ayudante no graduado en 2004-2007 y de una tesina de graduación en Bioquímica completa en 2010. Dada la falta de recursos humanos preparados en el equipo para afrontarla tuvo períodos de inactividad prolongados (2002-2004 y 2007-2009). El estudiante que desarrolló su tesina en la temática optó por otro tema de tesis para su posgrado en el LQTC, pero continuó trabajando en esta línea. Se espera que pueda darle un cierre en 2017 ya en su etapa post-doctoral. También dentro del capítulo de reacciones radicalarias, se trabajó con procesos de abstracción de hidrógeno iniciados por reacción de radicales hidroxilo con prolina. En este caso el trabajo se encuadró en una tesis doctoral (Signorelli) y se desarrolló entre 2011 y 2015.

Fundamental

5 horas semanales

Facultad de Ciencias, Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC), Coordinador o Responsable

Equipo: J. BONANATA, L. LUCCHINI, SIGNORELLI, S., M. MACHADO

Palabras clave: Cationes radicales distónicos Catálisis enzimática Efectos del entorno proteico Ab initio-DFT-PCM

Áreas de conocimiento:

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

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

computacional

Caracterización del mecanismo y cinética de procesos redox en proteínas (08/2010 - a la fecha)

Estudio del mecanismo de reacciones redox en proteínas. Los primeros antecedentes de este tipo corresponden al estudio de reacciones de oxidación ligadas al mecanismo de acción catalítica de la peroxiredoxina 5 sobre H₂O₂, que fuera iniciado como trabajo de tesina de graduación en 2010 y continuado como tesis de posgrado desde 2013, ampliando los estudios a la Prx6. Posteriormente, en 2011 se sumó el estudio de este tipo de procesos sobre el tiol de la albúmina sérica humana, iniciado en el contexto de uno de los posgrados en curso en el LQTC, próximo a concluir en 2016. Estos estudios se realizan como contrapartida de estudio experimentales. También dentro de esta línea se encuadran estudios del mecanismo Redox de enzimas NADH-Fumarato reductasas.

Fundamental

5 horas semanales

Facultad de Ciencias (UdelaR), Laboratorio de Química Teórica y Computacional, Instituto de Química Biológica, Coordinador o Responsable

Equipo: B. ÁLVAREZ, G. FERRER-SUETA, S. PORTILLO, J. BONANATA, S. SASTRE

Caracterización del mecanismo de procesos relevantes en Química Troposférica y su contaminación (09/1995 - 09/1999)

Esta línea fue iniciada en el contexto de la etapa post-doctoral desarrollada en el grupo de Don Truhlar en Minneapolis, y fue continuada en el período 1997-1999 al asumir la conducción del LQTC en Montevideo, trabajando con colaboradores de perfil en Ingeniería Química y un estudiante de Maestría con baja dedicación, que terminó abandonando los estudios tras un año de desarrollo sin obtener beca. A partir de 1999 con la integración de la unidad al Instituto de Química Biológica fue necesario dedicar los esfuerzos de generar recursos humanos desde el pre-grado y establecer nuevas líneas de investigación en el área bioquímica/biomédica, integrado el grupo sólo con colaboradores no graduados del área bioquímica no fue posible continuar con su desarrollo

Mixta

20 horas semanales

Facultad de Ciencias-UDELAR & Universidad de Minnesota-USA, Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC) & Dept. of Chemistry, Coordinador o Responsable

Equipo: PROF. AGR. GR.4 DT LQTC, L. LUCCHINI, L. CARRASCO

Palabras clave: Teoría Variacional del Estado de Transición Cinética Química Mecanismos de procesos troposféricos Modelado cuántico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente / Meteorología y Ciencias Atmosféricas / Química de la Atmósfera y su contaminación

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

Modelado de reacciones químicas de aldehídos en fase condensada y extensiones del modelo PCM (09/1990 - 09/1999)

Tema de trabajo de tesis doctoral. Centrado en reacciones de aldehídos de interés químico y biológico.

40 horas semanales

Univesita degli Studi di Pisa, ICQEM - Facoltà di Scienze, Coordinador o Responsable

Equipo:

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

PROYECTOS DE INVESTIGACIÓN Y DESARROLLO

Caracterización mediante modelado y simulación computacional de los efectos de la glicación sobre péptidos y proteínas de relevancia fisiológica. (03/2001 - a la fecha)

Mediante modelado QM y QM/MM y simulaciones, caracterizamos las propiedades de los aductos de péptidos y proteínas de relevancia en el desarrollo de patologías humanas (cáncer, Alzheimer, aterosclerosis y Diabetes) en busca de identificar nuevos marcadores para su detección precoz y blancos para tratamiento farmacológico. Entre las proteínas ligadas a diabetes

2 horas semanales

Facultad de Ciencias, Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:2

Equipo: V. LEONE , T. MEIRELLES

Palabras clave: Glicación Albúmina, Hemoglobina, LDL y fosfolípidos Histonas, ADN Péptido beta-amiloide, proteína TAU

Áreas de conocimiento:

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

Estudio del mecanismo de acción del Cisplatino y proposición de nuevos análogos como agentes quimioterapéuticos (03/1999 - a la fecha)

En este proyecto, presentado ante la convocatoria CSIC I+D de 1999, estudiamos los procesos que experimenta el Cisplatino (acuación y platinación de ADN) una vez que ingresa al organismo y que explican su eficacia y la aparición de resistencia y efectos colaterales, en busca de proponer alternativas más eficaces. Este proyecto fue el primero desarrollado para el contexto del Instituto de Química Biológica y estudiantes de Bioquímica, permitiendo hasta el momento que en su encuadre se desarrollaran Tesinas de graduación, proyectos de iniciación a la investigación, pasantías de investigación y tesis de posgrado. No obstante carecer actualmente de financiación específica, el proyecto continúa en marcha y sigue dando el espacio para proponer nuevas investigaciones, como la caracterización de compuestos de Pt(IV) que estamos actualmente desarrollando.

2 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

Doctorado:1

Financiación:

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

Equipo: PABLO D. DANS , A. MERLINO , PROF. AGR. GR.4 DT LQTC (Responsable) , A. PITTINI , L. COUTO

Palabras clave: Anticancerígenos de Pt/Pd Mecanismo de acción a nivel molecular

Áreas de conocimiento:

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

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) (06/2004 - a la fecha)

Este proyecto tiene tres componentes. La primera se orientó a estudiar detalladamente las propiedades químicas y fotofísicas de una serie de compuestos de fórmula general $[Ru(II)(dppz)L_2]^{2+}$ que poseen la característica de actuar como switches moleculares de luz (emiten en condiciones selectivas a sus interacciones) y pueden ser usados como sensores para daño de ADN. Esto se encara con técnicas DFT, PCM y TD-DFT. La segunda parte se orienta a determinar un conjunto de estructuras de ADN en condiciones fisiológicas, analizando la reactividad de las nucleobases, y la introducción de modificaciones oxidativas. Finalmente estudiamos las interacciones entre los switches moleculares y estas estructuras de ADN. Estas dos últimas líneas se desarrollan combinando estrategias QM y QM/MM con simulaciones de dinámica molecular.

2 horas semanales

Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Investigación

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:5

Doctorado:1

Financiación:

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

Equipo: PABLO D. DANS , A. MERLINO , G. MOURGLIA , E. L. COITIÑO (Responsable) , M. MACHADO , L. DARRÉ , A. CASTRO

Palabras clave: Sensores de Ru(II)dppzL2 plantillas de ADN - Dinámica Molecular

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Enzimología Computacional: ¿Cationes radicales distónicos en la transformación del sustrato del sistema Etanolamina Amonio Liasa/B12? (06/2000 - a la fecha)

Investigación sobre el mecanismo y cinética de los procesos de transformación de etanolamina catalizados por etanolamina amonio-liasa, uno de los mecanismos principales de obtención de C/N y energía por parte de microorganismos entéricos patógenos.

2 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

Equipo: J. BONANATA

Núcleo Interdisciplinario de Computación Científica de Alto Desempeño (08/2010 - a la fecha)

Integración del LQTC al Núcleo de Investigación y Formación recientemente creado a iniciativa de Facultad de Ingeniería, UdelaR. Gridificación de paquetes de Química Computacional

1 horas semanales

Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Desarrollo

Integrante del Equipo

En Marcha

Equipo: S. NESCHMANOW (Responsable)

Palabras clave: Computación científica Cálculo complejo alta performance

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Ingeniería y Tecnología / Ingeniería Eléctrica, Ingeniería Electrónica e Ingeniería de la Información /

Ingeniería de Sistemas y Comunicaciones / Cálculo científico de alto desempeño

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Estudio del equilibrio conformacional fully-folded locally-unfolded y de la función del residuo Glu143 en el mecanismo de PRDX5 (01/2016 - a la fecha)

Se trata de un proyecto de investigación de iniciación de una de mis estudiantes de doctorado y ayudante en el LQTC, la Lic. Stephanie Portillo, que abarca parte de los temas de su tesis, desarrollada bajo mi dirección académica y de tesis (esto último junto al Prof. G- Ferrer-Sueta) Actúo como tutora del proyecto, financiado por CSIC en el llamado 2015 de proyectos de iniciación a la Investigación. Modalidad I.

5 horas semanales

Facultad de Ciencias, UdelaR, LQTC-IQB

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:1

Financiación:

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

Equipo: STEPHANIE PORTILLO (Responsable) , G. FERRER-SUETA

Palabras clave: Peroxiredoxina 5 cambio conformacional mecanismo molecular del ciclo catalítico

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Modelado computacional de proteínas, QM/MM, dinámica molecular

Efectos de la glicación por metilgloxal sobre propiedades de la albúmina humana y su tiol libre (04/2014 - a la fecha)

Este proyecto corresponde a parte de la tesis de uno de mis estudiantes de doctorado, el Lic. Jenner Bonanata, que dirijo en el LQTC como Directora Académica y de Tesis (esta última parte compartida con la Dra. Beatriz Álvarez, del Lab. Enzimología del IQB. Fue financiado en 2014 por la CSIC-UdelaR, como proyecto de iniciación a la investigación, Modalidad 1.

5 horas semanales

Facultad de Ciencias, UdelaR, LQTC-IQB

Investigación

Integrante del Equipo

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Doctorado:1

Financiación:

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

Equipo: J. BONANATA (Responsable)

Palabras clave: Glicación metilglicoxal albúmina

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de proteínas, QM/MM, dinámica molecular

Fomentando la metacognición y el desarrollo de pensamiento autónomo y crítico desde ambientes de aprendizaje cooperativo/colaborativo en Físicoquímica Moderna (06/2009 - 12/2010)

La asignatura Físicoquímica Moderna de la Licenciatura en Bioquímica (ex-Físicoquímica II-EPM) constituye un espacio de la educación superior desde donde el equipo docente del Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC) de Facultad de Ciencias lleva adelante desde hace 10 años un trabajo sistemático y sostenido de búsqueda, implantación, análisis y perfeccionamiento permanente de estrategias de enseñanza innovadoras para su contexto, orientadas a mejorar la calidad de los aprendizajes logrados, tanto en el ámbito de lo estrictamente disciplinar, como en lo relativo al desarrollo de competencias generales, igualmente indispensables para preparar profesionales de la ciencia/tecnología autónomos, críticos, flexibles, capaces de comunicar y adaptarse a los cambios de su medio y de los conocimientos. Resultado de esta labor, fuertemente apoyada en una óptica de personalización de la enseñanza en ambientes de aprendizaje cooperativo/colaborativo, que incorpora un sistema de seguimiento, sostén y evaluación continua formativa por múltiples vías (fichas estudiantiles, discusiones orales, construcción de mapas conceptuales, portafolios, trabajos escritos, foros electrónicos, desarrollo de un proyecto integrador que exige elegir y diseñar estrategias fundamentadas para atacar un problema real abierto, planificando y dando forma a la propuesta de un procedimiento para su ejecución) se ha logrado que la asignatura sea una oferta universitaria sólida e integrada en lo disciplinar, con índices de aprobación elevadísimos (>90%), rendimientos académicos promediando el rango muy bueno y deserción marginal. Así el primer objetivo de este proyecto es formalizar esta exitosa labor de investigación y práctica educativa, procesando rigurosamente -con el soporte de expertos en educación- la abundante información recabada en estos años, para elaborar un estudio longitudinal del caso, que pueda ser comunicado y difundido en forma amplia, en tanto sus características hacen viable la transferencia de la experiencia a otros ambientes de aprendizaje, en los que puede tener un impacto significativo sobre la calidad de los procesos allí desarrollados. El grupo de actividades asociadas a esta componente del proyecto se planifica para ser desarrollado en los meses 3-12 del proyecto (setiembre 2008-junio 2009). El segundo objetivo que constituye otra línea a desarrollar en este proyecto, se orienta al análisis, mejora y establecimiento de estrategias didácticas innovadoras, incorporadas más recientemente a nuestra configuración didáctica con el fin de incentivar el desarrollo de competencias generales superiores (habilidades metacognitivas, flexibilidad, autonomía y criterio propio, ejercitación y calibración de la capacidad de evaluar, autoevaluar y coevaluar entre pares en ambientes cooperativos/colaborativos, en los que se intenta elucidar estrategias eficaces para favorecer la instalación de dinámicas intersubjetivas efectivas e integradoras, y el uso participativo de foros electrónicos como herramienta para ensayar y desarrollar aptitudes de argumentación y manejo de la controversia académica). El período previsto para desarrollar las actividades de esta línea, generando materiales y procesando los resultados se extiende desde julio 2008 hasta marzo 2009 (meses 1-9 del proyecto).

8 horas semanales

Facultad de Ciencias, Laboratorio de Química Teórica y Computacional

Investigación

Coordinador o Responsable

En Marcha

Alumnos encargados en el proyecto:

Pregrado:3

Equipo: A. MERLINO, A. PITTINI, J. BONANATA, STEPHANIE PORTILLO, M. MIGUEZ, A. CZERWONOGORA

Palabras clave: Investigación Educativa Desarrollo metacognición y pensamiento autónomo

Enseñanza y evaluación con mapas conceptuales evaluación, autoeval. y matrices de valoración

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos
Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Educación Universitaria - Didáctica y evaluación

Abordaje de problemas de Ciencias de la Vida desde una perspectiva multidisciplinaria (06/2009 - 08/2010)

Este proyecto integra en una única propuesta de trabajo a químicos, bioquímicos y biólogos quienes ya han realizado propuestas educativas tendientes a fortalecer las capacidades de investigación de los estudiantes de grado. Por tal motivo, la consecución de esta propuesta permitirá consolidar acciones ya realizadas y profundizarlas mediante la implementación de una nueva aproximación de carácter multidisciplinario.

2 horas semanales
Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional
Desarrollo
Integrante del Equipo
Concluido
Alumnos encargados en el proyecto:
Pregrado:3
Financiación:
Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR, Uruguay, Apoyo financiero
Equipo: STEPHANIE PORTILLO , A. SAADOUN (Responsable) , M. GONZÁLEZ , M. V. LÓPEZ
Palabras clave: desarrollo de capacidades de investigación aproximación multidisciplinaria Ácidos grasos omega 3 y omega 6
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Otros Tópicos Biológicos / Fisiología, Nutrición, Patologías
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Síntesis y caracterización espectroscópica

Microsíntesis de reacciones químicas: estudio teórico de la estructura y reactividad de cationes radicales distónicos (05/1995 - 10/1999)

Modelado de la estructura y reactividad de cationes radicales de complejos de enlace de hidrógeno.
15 horas semanales
Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional
Investigación
Coordinador o Responsable
Concluido
Alumnos encargados en el proyecto:
Pregrado:2
Financiación:
Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR, Uruguay, Apoyo financiero
Equipo: L. LUCCHINI , SOLÁ, M. , DURÁN, M. , VENTURA, O.N.
Palabras clave: Cationes radicales distónicos MP2 - DFT
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Computational Modeling of the Mechanism and Kinetics of Chemical Processes of Atmospheric Interest (11/1997 - 11/1998)

Proyecto sobre modelado de mecanismo y cinética de reacciones de interés atmosférico. Se formó a nivel de grado y posgrado y se cooperó con dos grupos españoles y uno brasileño
5 horas semanales
Facultad de Ciencias , Laboratorio de Química Teórica y Computacional
Investigación
Coordinador o Responsable
Concluido
Alumnos encargados en el proyecto:
Pregrado:1
Maestría/Magister:1
Financiación:
Institución del exterior, Apoyo financiero
Equipo: ANGELS GONZÁLEZ-LAFONT , J. CORCHADO , J.M. LLUCH
Palabras clave: Química Atmosférica Contaminación Troposférica Cinética VTST con efecto túnel
Modelado computacional de reacciones
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Cinética

DIRECCIÓN Y ADMINISTRACIÓN

(04/1997 - a la fecha)

Facultad de Ciencias, Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC)
6 horas semanales

(09/2012 - 12/2016)

Facultad de Ciencias, UdelaR, Instituto de Química Biológica
6 horas semanales

(03/2001 - 04/2003)

Facultad de Ciencias, Instituto de Química Biológica
10 horas semanales

DOCENCIA

Licenciatura en Bioquímica (03/1998 - a la fecha)

Grado

Responsable

Asignaturas:

Fisicoquímica Moderna - Estructura y Propiedades Moleculares (BFQ003) -

Teórico+discusiones+tutorías proyecto, 7 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional, Espectroscopía, Termodinámica Estadística

Licenciatura en Bioquímica (05/1998 - a la fecha)

Grado

Responsable

Asignaturas:

Curso Taller de Química Computacional - Electiva- Módulo I (modelado de procesos químicos reactivos), 9 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Cuántica, Modelado procesos reactivos

Licenciatura en Bioquímica (03/2013 - a la fecha)

Grado

Responsable

Asignaturas:

Pasantía de profundización electiva en Química Computacional, 10 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional de Procesos Reactivos

Posgrado en Química - Maestría y Doctorado (11/2016 - 12/2016)

Doctorado

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Predicción y análisis de la estructura e interacciones de Proteínas, en diálogo con la experimentación, 40 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional - Modelado proteínas

Posgrado en Química - Maestría y Doctorado (11/2016 - 11/2016)

Especialización

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Computational Thermochemistry & Kinetics, 16 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional - VTST

Posgrado en Química - Maestría y Doctorado (10/2012 - 05/2016)

Especialización

Invitado

Asignaturas:

Enzimología, Facultad de Ciencias, 2 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Enzimología (computacional)

Posgrado Latinoamericano en Biofísica (PosLatAm) (11/2015 - 11/2015)

Doctorado

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

VII Poslatam course: Membrane Lipids, Transporters, Channels, and...all that crosstalk, 24 horas, Teórico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Posgrado en Química - Maestría y Doctorado (02/2014 - 03/2014)

Especialización

Invitado

Asignaturas:

Curso PEDECIBA-Química - Espectroscopía IR de biomoléculas, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Licenciatura en Bioquímica (09/2013 - 11/2013)

Grado

Responsable

Asignaturas:

Seminario 959 - Bioinformática de Proteínas - Introducción a la Biología II, 6 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

(12/2011 - 12/2011)

Especialización

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Herramientas Bioinformáticas para el estudio de la estructura de proteínas -, 40 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

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

Posgrado en Química - Maestría y Doctorado (11/2011 - 11/2011)

Doctorado

Invitado

Asignaturas:

Tópicos actuales de la Química Bioinorgánica (III). Teórico sobre modelado computacional de compuestos de coordinación bioactivos, 2 horas, Teórico

Áreas de conocimiento:

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

Licenciatura en Bioquímica (11/2009 - 08/2010)

Grado

Responsable

Asignaturas:

Curso CSE-CSIC - Fomentando la investigación interdisciplinaria en la enseñanza de Cs. de la Vida, 20 horas, Teórico-Práctico

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Métodos de Investigación en Bioquímica / Modelado computacional de interacciones covalentes y no covalentes

Posgrado en Química - Maestría y Doctorado (06/2009 - 03/2010)

Doctorado
Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Theoretical/PRactical Course on Molecular Simulation and Design., 40 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Modelado cuántico, QM/MM y simulaciones

Licenciatura en Bioquímica (03/2006 - 06/2007)

Grado

Invitado

Asignaturas:

Química General - Teórico Estructura Molecular e interacciones, 5 horas, Teórico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Estructura atómica y molecular, enlace químico

Maestría en Ingeniería Química (08/1999 - 12/2003)

Maestría

Responsable

Asignaturas:

Química de la Atmósfera y Polución, 10 horas, Teórico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Atmosférica
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente / Meteorología y Ciencias Atmosféricas / Química de la Atmósfera

Licenciatura en Bioquímica (08/2000 - 08/2003)

Grado

Invitado

Asignaturas:

Química Analítica - Teóricos tema Métodos Espectrofotométricos de análisis, 4 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

Posgrado en Química - Maestría y Doctorado (02/2003 - 05/2003)

Maestría

Responsable

Asignaturas:

Comjugando métodos teóricos y experimentales para el estudio de la cinética de procesos químicos, 6 horas, Teórico

Areas de conocimiento:

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

Licenciatura en Bioquímica (03/1997 - 06/2002)

Grado

Responsable

Asignaturas:

Modelos Teórico-Computacionales en Físicoquímica -Electiva, 9 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

Licenciatura en Bioquímica (07/1999 - 12/1999)

Grado

Organizador/Coordinador

Asignaturas:

Química Analítica - Curso de emergencia 1999, 7 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

Maestría en Química, Especialización profesional (08/1997 - 06/1998)

Especialización

Responsable

Asignaturas:

Termodinámica Estadística y aplicaciones a la Cinética Química, 6 horas, Teórico

Areas de conocimiento:

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

Licenciatura en Ciencias Biológicas (05/1995 - 06/1995)

Grado

Responsable

Asignaturas:

Química General - Cinética Química - Teórico+Ejercicios, 5 horas, Teórico-Práctico

Areas de conocimiento:

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

EXTENSIÓN

(08/2016 - 09/2016)

Intendencia Municipal de Montevideo - Atrio Central, Feria de divulgación Latitud Ciencias 2016
12 horas

Areas de conocimiento:

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

(05/2006 - 05/2016)

Facultad de Ciencias, Laboratorio de Química Teórica y Computacional
2 horas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Biológica -Química Teórica y Computacional
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente / Ciencias Medioambientales / Química de la Atmósfera y su contaminación

(05/2016 - 05/2016)

Facultad de Ciencias, Semana de la Ciencia y la Tecnología - Jornada de Puertas Abiertas
2 horas

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de moléculas y macromoléculas

(05/2016 - 05/2016)

Semana de la Ciencia y la Tecnología - MEC, Conferencias de divulgación científica - IFD de la Costa y CERP de Florida
2 horas

(06/2015 - 06/2015)

Semana de la Ciencia y la Tecnología 2015 - 3 conferencias, Ministerio de Educación y Cultura y Facultad de Ciencias-UdelaR
1 horas

Areas de conocimiento:

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

(05/2015 - 05/2015)

Facultad de Ciencias, UdelaR, Semana de la Ciencia y la Tecnología 2015-Jornada de Puertas Abiertas

1 horas

Áreas de conocimiento:

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

(09/2014 - 09/2014)

Intendencia Municipal de Montevideo, Feria de divulgación Latitud Ciencias 2014

1 horas

Áreas de conocimiento:

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

(06/2006 - 06/2013)

Articulación ANEP-UDELAR

1 horas

(11/2007 - 11/2009)

Articulación ANEP-UDELAR, Trabajo con Inspectoras de Química - CES (Rebollo, Soubirón)

2 horas

CAPACITACIÓN/ENTRENAMIENTOS DICTADOS

Facultad de Ciencias, Udelar, LQTC-IQB (03/2014 - 09/2014)

Pasantías de profundización (10-11 créditos) de 3 estudiantes de Licenciatura en Bioquímica

10 horas semanales

Áreas de conocimiento:

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

GESTIÓN ACADÉMICA

Miembro titular, representando al Instituto de Química Biológica - especial énfasis en temas de Informática y Enseñanza y Cálculo Intensivo (05/2009 - a la fecha)

Facultad de Ciencias, Comisión de Informática-Asesora del Consejo-2 sesiones mensuales

Participación en consejos y comisiones

Áreas de conocimiento:

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

Miembro titular docente, asesor del Consejo en políticas para las carreras de grado (06/2014 - a la fecha)

Facultad de Ciencias, Udelar, Comisión de Grado de la Facultad

Gestión de la Enseñanza

Miembro titular Mesa Directiva AGC (secretaría docente); Delegada docente titular por Facultad de Ciencias. (06/2010 - 06/2012)

Universidad de la República, Asamblea General del Claustro (AGC)

Participación en cogobierno

Delegada docente titular, Coordinadora de la Comisión (marzo 2008-Julio 2009; mayo-junio 2010) (03/2008 - 06/2010)

Asamblea del Claustro de Facultad, Comisión de Enseñanza (Coordinadora)

Participación en consejos y comisiones

Delegada docente titular (2007-2009) y suplente (2009-2010) (03/2007 - 06/2010)

Instituto de Química Biológica, Comisión Directiva

Participación en consejos y comisiones

Presidente de la Mesa del Claustro, delegada docente titular; miembro de comisiones (03/2006 - 03/2008)

Asamblea del Claustro de Facultad, Presidencia de la Mesa Directiva del órgano

Participación en cogobierno

Delegada docente en las Comisiones para redefinir los perfiles de egreso de la Lic. en Bioquímica (05/2003 - 05/2004)

Comisiones Interfacultades, Ciencias-Química // Ciencias-Ingeniería
Participación en consejos y comisiones

Directora de Instituto (03/2001 - 04/2003)

Instituto de Química Biológica, Dirección
Participación en consejos y comisiones

Delegada docente titular, gestión de la articulación entre carreras (03/2000 - 03/2003)

Facultad de Ciencias-Facultad de Química, Comisión Académica Interfacultades - Bioquímica-Bioquímico Clínico
Participación en consejos y comisiones

Delegada docente titular, integrante de la Comisión (03/2000 - 03/2002)

Asamblea del Claustro, Comisión de Planes de Estudio
Participación en cogobierno

Delegada docente suplente (11/1999 - 03/2001)

Instituto de Química Biológica, Comisión Directiva
Participación en consejos y comisiones

Delegada docente titular (11/1998 - 03/2001)

Consejo de Facultad, Comisión de informática
Participación en consejos y comisiones

Delegada docente titular (03/1998 - 03/2000)

Asamblea del Claustro, Comisión Posgrados, inserción laboral y relacionamiento con el medio
Participación en cogobierno

Delegada docente (06/1997 - 12/1999)

Comisión Coordinadora Docente, Licenciatura en Bioquímica
Gestión de la Enseñanza

Delegada docente titular, gestión y seguimiento de la ejecución presupuestal (06/1998 - 09/1999)

Comisión Asesora del área Bioquímica (CABQ), Ejecución presupuestal
Participación en consejos y comisiones

Delegada docente suplente (se indica sólo el período de actividad) (08/1995 - 09/1995)

Instituto de Química, Comisión Directiva
Participación en consejos y comisiones

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

Facultad de Química - UDeLaR

VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Funcionario/Empleado (06/1995 - 12/1995)

Profesor Adjunto de Química Cuántica ,20 horas semanales
Designada por concurso de méritos. Contrato por proyecto CONICYT-BID 009 + compensada.
Escala: Docente
Grado: Grado 3
Cargo: Interino

Colaborador (12/1987 - 12/1990)

Ayudante Honorario de Química Cuántica ,6 horas semanales
Ayudante Honorario, designada por 3 períodos consecutivos de un año por el Consejo de la Facultad. Carga horaria mínima a cumplir 6 hs/sem. Carga real desarrollada del orden de 20 hs/sem.
Escalafón: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

Funcionario/Empleado (09/1989 - 12/1989)

Ayudante de Química Cuántica ,20 horas semanales
Designada por concurso de méritos, cargo de 3 meses financiado por economías
Escalafón: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

Colaborador (12/1986 - 12/1987)

Aspirante a Ayud. Honorario de Quím. Cuántica ,6 horas semanales
Designada por el Consejo por concurso de pruebas por un período de un año, paso previo a ingresar como Ayudante Honorario. La carga horaria semanal fue del orden de 20 hs/sem.
Escalafón: Docente
Grado: Grado 1
Cargo: Interino

ACTIVIDADES

LÍNEAS DE INVESTIGACIÓN

Caracterización Físicoquímica de Plásticos Polivinílicos Derivados de Aldehídos de Interés Químico y Bioquímico (06/1988 - 06/1991)

Modelado de procesos de hidratación de aldehídos simples con métodos cuánticos semiempíricos (en Montevideo) y ab initio (en Barcelona)
20 horas semanales
Cátedra de Química Cuántica , Integrante del equipo
Equipo:
Palabras clave: modelado de reacciones de aldehídos
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Cuántica, Físicoquímica Orgánica

DOCENCIA

Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA) (05/1995 - 09/1995)

Especialización

Asignaturas:
Química Cuántica - Curso introductorio, 5 horas, Teórico-Práctico
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Aplicaciones de la Mecánica Cuántica a sistemas moleculares

(08/1991 - 09/1991)

Especialización

Asignaturas:
Mecánica Cuántica, 6 horas, Teórico
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Mecánica Cuántica

CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: 8 horas
Carga horaria de investigación: 20 horas
Carga horaria de formación RRHH: 12 horas
Carga horaria de extensión: 4 horas
Carga horaria de gestión: 6 horas

Producción científica/tecnológica

Inicialmente determiné mecanismos de reacción de aldehídos catalizados por solvente (agua bifuncional), elucidando el papel de redes de enlace de hidrógeno (EdH) moduladoras de la reactividad y caracterizé radicales distónicos por EdH de relevancia biológica y atmosférica. Contribuí validando métodos semiempíricos para describir EdH y a extender modelos del entorno MST-PCM para reacciones en solución y sistemas complejos. Posteriormente produje/validé modelos QM:QM (IMOMO) para evaluar energías de reacción y modelos de cinética IVTST-M+efecto túnel, generando herramientas computacionales (Polyrate/Gaussrate) de altísimo impacto mundial, caracterizando reacciones de contaminación troposférica (explicando distribuciones isotópicas de hidrocarburos para NASA). Con apoyo TWAS+CSIC formé mi grupo en Uruguay en 1997, sentando bases para investigar y formar RRHH en Química Atmosférica. Escribí un libro inédito e impartí el 1er curso de Química Atmosférica y Polución del país, siendo pionera en FCIEN-UdelaR en educar a distancia desde 2003 en esta área y Bioinformática Estructural. En 1999 recibí el Premio CONICYT-TWAS-Jóvenes-investigadores y la unidad académica que monté y lidero (LQTC-FCIEN) se integró al Instituto de Química Biológica (IQB), estructura que ayudé a fundar, siendo su Directora en 2001-2003; 2012-2014; 2014-2016. Esto implicó desplazar mis temas de investigación hacia modelar estructura y reactividad en sistemas complejos de interés bioquímico/biomédico y montar infraestructura de cálculo científico junto a un programa de formación en modelado computacional para Bioquímicos que integró la Bioinformática Estructural, aportando al diseño curricular de grado y posgrado en ambas áreas en UdelaR. Hasta 2009 (1er Maestría+Doctorado que oriento en Bioquímica computacional concluye en dic.2008) fui única responsable de formar >20 jóvenes en pregrado/posgrado en esta nueva área (y crear capacidad local sólida insumió mi mayor esfuerzo esa década) mientras senté bases para modelar procesos químicos e interacciones moleculares relevantes a 3 patologías humanas de alto impacto (Cáncer, Alzheimer y Diabetes) en la bisagra del estrés carbonílico con el oxidativo y también para aportar al diseño racional de moléculas bioactivas para diagnóstico/tratamiento-farmacológico, particularmente agentes de Pt/Pd/Ru con blanco en ADN o enzimas. Buscamos patrones para proponer/optimar agentes quimioterapéuticos caracterizando su biotransformación e interacciones con ADN/proteínas y mejoramos la comprensión de su reactividad y modulación del entorno por EdH, área luego extendida a compuestos de vanadio (codirijo otro doctorado, 2015-). En 2009-2010 debí refundar mi grupo (el personal que formé en el LQTC-FCIEN fue contratado en masa para un nuevo Laboratorio en el IPMON) tomando la oportunidad para pasar el acento al modelado de proteínas, iniciando cooperación con grupos experimentales nacionales, argentinos, españoles, polacos y grupos teóricos de Argentina, Chile, Brasil, España, Portugal y USA. Desde entonces mi contribución central viene siendo predecir/explicar in silico estructuras proteicas de relevancia fisiológica y su modificación, elucidando reactividad, modulación por su entorno local y solvente y mecanismos detallados de reacciones redox (tiol en albúmina, peroxiredoxinas, caspasa-3; fumarato en NADH-Fumarato Reductasas); radicalarias (Etanolamina Amonio Liasa; prolina) y glicación por azúcares/oxoaldehídos de péptidos/proteínas (b-amiloide/insulina; albúmina; Histona H1; Prdx6) o su interacción con lípidos y nitroderivados (PPARg; HAMLET; SF1; PGHS-1/2). Los últimos 5 años intensificamos tesis de grado/posgrado en el área, consolidando producción nacional muy apreciada a nivel internacional (índice h global 26; conferencista invitada USA, Latinoamérica, Europa y Asia; revisora y editora de revistas internacionales). En 2017 nos integramos al CelBio.

Producción bibliográfica

ARTÍCULOS PUBLICADOS

ARBITRADOS

The thiol of human serum albumin: acidity, microenvironment and mechanistic insights on its oxidation to sulfenic acid (Completo, 2017)

J. BONANATA, L. TURELL, L. ANTMANN, G. FERRER-SUETA, S. BOTASINI, E. MÉNDEZ, B. ÁLVAREZ, E. Laura Coitiño

Free Radical Biology and Medicine, v.: 108 p.:952 - 962, 2017

Palabras clave: Albumin thiol pKa HSA Cys34 reactivity HSA oxidation by H₂O₂

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Modelado de pKa de residuos proteicos por cpH-MD

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

Electroquímica / pKa de residuos proteicos por modelado y experimento

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Elsevier B. V.

ISSN: 08915849

DOI: [10.1016/j.freeradbiomed.2017.04.021](https://doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2017.04.021)

The Chemical Basis of Thiol Addition to Nitro-Conjugated Linoleic Acid, a Protective Cell-Signaling Lipid (Completo, 2017)

L. TURELL, D. VITTURI, E. Laura Coitiño, L. LEBRATO, M. MÖLLER, C. SAGASTI, SONIA R. SALVATORE, STEVEN R. WOODCOCK, B. ÁLVAREZ, F. SCHOPFER

Journal of Biological Chemistry, v.: 292 4, p.:1145 - 1159, 2017

Palabras clave: reaction mechanism nitro linoleic acid thio-Michael addition

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Mecanismos de reacción por modelado computacional

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00219258

DOI: [10.1074/jbc.M116.756288](https://doi.org/10.1074/jbc.M116.756288)

<http://www.jbc.org/content/early/2016/12/06/jbc.M116.756288.abstract>

Enviado el /09/16; Aceptado en forma final el 06/12/16. Publicado: 27/01/17 Seleccionado como Paper of the Week

Scopus® WEB OF SCIENCE™

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

G. SCALESE, J. BENÍTEZ, S. ROSTAN, I. CORREIA, L. BRADFORD, M. VIEITES, L. MININI, A. MERLINO, E. Laura Coitiño, E. BIRRIEL, J. VARELA, H. CERECETTO, M. GONZÁLEZ, COSTA PESSOA, J., D. GAMBINO

Journal of Inorganic Biochemistry, v.: 147 p.:116 - 125, 2015

Palabras clave: oxidovanadium bioactive compounds DNA-ligand docking DFT structure

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Computacional, Bioquímica Computacional

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

Medio de divulgación: Papel

Escrito por invitación

ISSN: 01620134

DOI: [10.1016/j.jinorgbio.2015.03.002](https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2015.03.002)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0162013415000665>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Functional Characterization of Two Mutations Located in the Ligand Binding Domain in the SF1 (Completo, 2015)

PEREZ-GARRIDO, N., SARACO, N., MARINO, R., RAMIREZ, P., CIACCIO, M., CONSTANZO, M., WARMAN, D., MININI, L., PORTILLO-LEDESMA, S., RIVAROLA, MA, E. Laura Coitiño, BELGOROSKY, A.

International Journal of Endocrinology and Metabolic Disorders, v.: 1 4, p.:1 - 8, 2015

Palabras clave: SF-1 Nuclear Receptor LBD mutations Protein-Lipid interactions

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica Computacional

Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Clínica / Endocrinología y Metabolismo / Endocrinología

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

Electroquímica / Química Computacional, Bioinformática Estructural

Medio de divulgación: Internet

Lugar de publicación: USA

ISSN: 2380548X

DOI: [10.16966/2380-548X.117](https://doi.org/10.16966/2380-548X.117)

<https://www.sciforschenonline.org/journals/endocrinology/article-data/IJEMD-1-117/IJEMD-1-117.pdf>

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

E. RODRÍGUEZ ARCE, F. MOSQUILLO, L. PÉREZ-DÍAZ, G. ECHEVERRÍA, O.E. PIRO, A. MERLINO, E. Laura Coitiño, C. MARÍNGOLO RIBERO, C. Q. F. LEITE, F. R. PAVAN, L. OTERO, D. GAMBINO

Dalton Transactions, v.: 44 p.:14453 - 14464, 2015

Palabras clave: bioactive Pt/Pd species DFT characterization synthesis and physicochemical characterization biological anti-T.cruzi activity

Areas de conocimiento:

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Inorgánica Medicinal

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: UK

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™

Connecting proline and γ -aminobutyric acid in stressed plants through non-enzymatic reactions (Completo, 2015)

SIGNORELLI, S., PABLO D. DANS, E. Laura Coitiño, O. BORSANI, J. MONZA

PLoS ONE, v.: 10 3, 2015

Palabras clave: Mecanismos de reacción Modelado DFT/PCM

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: USA

ISSN: 19326203

DOI: [10.1371/journal.pone.0115349](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0115349)

<http://journals.plos.org/plosone/article?id=10.1371/journal.pone.0115349>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Reaction of hydrogen sulfide with disulfide and sulfenic acid to form the strongly nucleophilic disulfide (Completo, 2015)

E. CUEVASANTA, M. LANGE, J. BONANATA, E. Laura Coitiño, G. FERRER-SUETA, M. FILIPOVIC, B. ÁLVAREZ

Journal of Biological Chemistry, v.: 290 p.:26866 - 26880, 2015

Palabras clave: Enzimología RSSH + HS

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: USA

ISSN: 00219258

DOI: [10.1074/jbc.M115.672816](https://doi.org/10.1074/jbc.M115.672816)

<http://www.jbc.org/content/290/45/26866>

Seleccionado Paper of the Week por la revista.

Scopus® WEB OF SCIENCE™

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

A. MERLINO, M. VIEITES, D. GAMBINO, E. Laura Coitiño

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

Palabras clave: Parasitic Fumarate reductases Structure of the active site

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10933263

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

Trabajo aceptado en diciembre 2013, JMGM-D-13-00026R3

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Molecular Mechanisms for the Reaction Between OH Radicals and Proline: Insights on the Role as ROS Scavenger in Plant Stress (Completo, 2014)

SIGNORELLI, S., E. Laura Coitiño, O. BORSANI, J. MONZA

Journal of Physical Chemistry B, v.: 118 1, p.:37 - 47, 2014

Palabras clave: DFT-PCM mechanism modeling Proline as OHscavenger Proline accumulation in

plant stress

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de enzimas y su mecanismo

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Ciencias de las Plantas, Botánica / Stress en plantas y acumulación de prolina

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10895647

DOI: [10.1021/jp407773u](https://doi.org/10.1021/jp407773u)

<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/jp407773u>

Trabajo aceptado en forma final el 14/12/2013. Publication Date (Web): December 14, 2013

Deconstructing the catalytic efficiency of peroxiredoxin-5 peroxidatic cysteine (Completo, 2014)

STEPHANIE PORTILLO, F. SARDI, B. MANTA, M.V. TOURN, A. CLIPPE, B. KNOOPS, B. ÁLVAREZ, E. Laura Coitiño, G. FERRER-SUETA

Biochemistry, v.: 53 38, p.:6113 - 6125, 2014

Palabras clave: Peroxiredoxin V Catalytic mechanism

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: USA

ISSN: 00062960

DOI: [10.1021/bi500389m](https://doi.org/10.1021/bi500389m)

<http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/bi500389m>

Scopus® WEB OF SCIENCE®

Theoretical Assessment of the Photosensitization Mechanisms of Porphyrin-Ruthenium(II) Complexes for the Formation of Reactive Oxygen Species (Completo, 2014)

E. Laura Coitiño, A. MELLA, CÁRDENAS-JIRÓN

Journal of Photochemistry and Photobiology A-Chemistry, v.: 294 p.:68 - 74, 2014

Palabras clave: photosensitization mechanisms porphyrin-Ru(II)-polypyridyl complexes

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Elsevier,

ISSN: 10106030

DOI: [10.1016/j.jphotochem.2014.08.003](https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2014.08.003)

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/aip/10106030>

Enviado: 14/03/14 - Aceptado en forma final: 07/08/14 Publicación de PDF completo en la Web 19/07/2014, como Article in press

Scopus® WEB OF SCIENCE®

Nitrogen Dioxide Solubility and Permeation in Lipid Membranes (Completo, 2011)

SIGNORELLI, S., MÖLLER, M., E. Laura Coitiño, DENICOLA, A.

Archives of Biochemistry and Biophysics, v.: 512 2, p.:190 - 196, 2011

Palabras clave: Solubilidad de gases en agua y octanol Modelado DFT/PCM PERmeabilidad de membranas lipidicas a NO2

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Elsevier, Netherlands

ISSN: 00039861

DOI: [10.1016/j.abb.2011.06.003](https://doi.org/10.1016/j.abb.2011.06.003)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003986111002141>

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)

A. MERLINO, L. OTERO, D. GAMBINO, E. Laura Coitiño

European Journal of Medicinal Chemistry (electrónico), v.: 46 7, p.:2639 - 2651, 2011

Palabras clave: Compuestos de Pt/Pd

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 17683254

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

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0223523411002637>

Increasing Complexity Models for Describing the Generation of Substrate Radicals at the Active Site of Ethanolamine Ammonia-Lyase/B12 (Completo, 2011)

J. BONANATA, SIGNORELLI, S., E. Laura Coitiño

Computational and Theoretical Chemistry, v.: 975 p.:52 - 60, 2011

Palabras clave: Catálisis enzimática reaction mechanism Etanolamina Amonio Liasa-B12 radicales distónicos efectos del entorno (DFT/PCM)

Areas de conocimiento:

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

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: 10.1016/j.comptc.2011.07.029

ISSN: 2210271X

DOI: [10.1016/j.comptc.2011.07.029](https://doi.org/10.1016/j.comptc.2011.07.029)

<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2210271X11004038>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Density Functional Theory Characterization and Descriptive Analysis of Cisplatin Related Compounds (Completo, 2009)

PABLO D. DANS, E. Laura Coitiño

Journal of Chemical Information and Modeling, v.: 49 6, p.:1407 - 1419, 2009

Palabras clave: DFT - PCMAnticancer Pt/Pd Datamining - Clustering & PCA

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: USA

ISSN: 15499596

DOI: [10.1021/ci800421w](https://doi.org/10.1021/ci800421w)

<http://pubs.acs.org/journal/jcisd8>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

Structural and Energetic Study of Cisplatin and Derivatives: Comparison of the Performance of Density Functional Theory Implementations (Completo, 2008)

PABLO D. DANS, ALEJANDRO CRESPO, DARÍO A. ESTRÍN, E. Laura Coitiño

Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 4 5, p.:740 - 750, 2008

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: ACS,USA

ISSN: 15499618

<http://pubs.acs.org/cgi-bin/abstract.cgi/jctc/2008/4/i05/abs/ct7002385.html>

Scopus® WEB OF SCIENCE™

How should we calculate Transition State Geometries for Radical Reactions? The Effect of Spin Contamination on the Prediction of Geometries for Open-Shell Saddle Points. (Completo, 2000)

YAO-YUAN CHUANG, E. Laura Coitiño, DONALD G. TRUHLAR

Journal of Physical Chemistry A, v.: 104 3, p.:446 - 450, 2000

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 10895639

<http://pubs.acs.org/cgi-bin/abstract.cgi/jpcafh/2000/104/i03/abs/jp993661v.html>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

Thermochemistry, solvation, and dynamics (Completo, 1999)

DONALD G. TRUHLAR , Y.-Y. CHUANG , E. Laura Coitiño , JOSÉ C. CORCHADO , CHRISTOPHER J. CRAMER

ACS Division of Fuel Chemistry, Preprints, v.: 44 3 , p.:452 - 458, 1999

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: USA

Escrito por invitación

ISSN: 05693772

https://web.anl.gov/PCS/acsfuel/preprint%20archive/Files/44_3_NEW%20ORLEANS_08-99_0452.pdf

Lista completa de autores: Donald G. Truhlar, Yao-Yuan (John) Chuang, E. Laura Coitiño, José C. Corchado, Christopher J. Cramer, Derek Dolney, Joachin Espinosa-García, Patton L. Fast, Gregory D. Hawkins, Yongho Kim, Jiabo Li, Benjamin Lynch, Mala L. Radhakrishnan, Orlando Roberto-Neto, Jocelyn M. Rodgers, Maria Luz Sinchez, Jordi Villi, Paul Winget, and Tianhai (Tony) Zhu,

Scopus[®]

Degenerate Lithium-Hydrogen Exchange Reactions: An Alternative Mechanism for Metalation of CH₄ in Gas Phase and Tetrahydrofuran Solution (Completo, 1998)

E. Laura Coitiño , ENIO CIUFFARIN , FRANCA M. FLORIS , JACOPO TOMASI

Journal of Physical Chemistry A, v.: 102 43 , p.:8369 - 8376, 1998

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: ACS, USA

ISSN: 10895639

<http://pubs.acs.org/cgi-bin/abstract.cgi/jpcafh/1998/102/i43/abs/jp981463i.html>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

Reaction Path and Dual-Level Dynamics Calculations of the CH₃F + OH Reaction (Completo, 1998)

JOAQUÍN ESPINOSA-GARCÍA , E. Laura Coitiño , ANGELS GONZÁLEZ-LAFONT , JOSE M. LLUCH

Journal of Physical Chemistry A, v.: 102 52 , p.:10715 - 10722, 1998

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: ACS, USA

ISSN: 10895639

<http://pubs.acs.org/cgi-bin/abstract.cgi/jpcafh/1998/102/i52/abs/jp9832138.html>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

Interpolated Variational Transition-State Theory by Mapping (Completo, 1998)

JOSÉ C. CORCHADO , E. Laura Coitiño , YAO-YUAN CHUANG , PATTON L. FAST , DONALD G. TRUHLAR

Journal of Physical Chemistry A, v.: 102 p.:2424 - 2438, 1998

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: ACS, USA

ISSN: 10895639

<http://pubs.acs.org/cgi-bin/abstract.cgi/jpcafh/1998/102/i14/abs/jp9801267.html>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

Dual-Level Direct Dynamics Calculations of Deuterium and Carbon-13 Kinetic Isotopic Effects for the Reaction Cl + CH₄ (Completo, 1998)

ORLANDO ROBERTO-NETO , E. Laura Coitiño , DONALD G. TRUHLAR

Journal of Physical Chemistry A, v.: 102 24 , p.:4568 - 4578, 1998

Palabras clave: Atmospheric Chemistry Kinetic Isotopic effects

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: ACS, USA

ISSN: 10895639

<http://pubs.acs.org/cgi-bin/abstract.cgi/jpcafh/1998/102/i24/abs/jp980759l.html>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Correlated Capped Subsystem Method for the Calculation of Substituent Effects on Bond Energies. (Completo, 1997)

E. Laura Coitiño , MOLLI NOLAND , DONALD G. TRUHLAR

Journal of Physical Chemistry A, v.: 101 7 , p.:1193 - 1197, 1997

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: ACS, USA

ISSN: 10895639

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

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Systematic Analysis of Bond Energies Calculated by the Integrated Molecular Orbital-Molecular Orbital (IMOMO) Method. (Completo, 1997)

E. Laura Coitiño , DONALD G. TRUHLAR

Journal of Physical Chemistry A, v.: 101 p.:4641 - 4645, 1997

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: ACS, USA

ISSN: 10895639

<http://pubs.acs.org/cgi-bin/abstract.cgi/jpcafh/1997/101/i25/abs/jp970520p.html>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Solvent Effects on the Internal Rotation of Neutral and Protonated Glyoxal. (Completo, 1996)

E. Laura Coitiño , JACOPO TOMASI

Chemical Physics, v.: 204 p.:391 - 402, 1996

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Elsevier, Holanda

ISSN: 03010104

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/03010104>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Density functional study of the isomerization of fluoro-and chloroformaldehyde radical cations. (Completo, 1996)

OSCAR N. VENTURA , MARTINA KIENINGER , E. Laura Coitiño

Journal of Computational Chemistry, v.: 17 11 , p.:1309 - 1317, 1996

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: John Wiley & Sons

ISSN: 01928651

<http://www3.interscience.wiley.com/journal/33822/home>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE[™]

Correlated Capped Subsystem Calculations as a Way to Include Electron Correlation Locally: A Test for Substituent Effects on Bond Energies. (Completo, 1996)

E. Laura Coitiño, DONALD G. TRUHLAR, KEIJI MOROKUMA

Chemical Physics Letters, v.: 259 p.:159 - 164, 1996

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Elsevier, Holanda

ISSN: 00092614

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

High-level Ab Initio Prediction of the Structure and IR Spectra of Formaldehyde-Water Radical-Cation Complexes (Completo, 1995)

E. Laura Coitiño, ALBERTO PEREIRA, OSCAR N. VENTURA

Journal of Chemical Physics, v.: 102 7, p.:2833 - 2840, 1995

Palabras clave: radical cation complexes Structure and IR spectra

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: AIP, Chicago, USA

ISSN: 00219606

<http://jcp.aip.org/>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

On the Evaluation of the solvent Polarization Apparent Charges in the Polarizable Continuum Model: A new formulation. (Completo, 1995)

E. Laura Coitiño, JACOPO TOMASI, ROBERTO CAMMI

Journal of Computational Chemistry, v.: 16 1, p.:20 - 30, 1995

Palabras clave: Polarizable Continuum Model Model extension solvent polarization apparent charges

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: John Wiley & Sons, Inc

ISSN: 01928651

<http://www3.interscience.wiley.com/journal/33822/home>

WEB OF SCIENCE™

Ab initio Study of the Structure of Radical Cations Derived from H-bonded Complexes: A Comparison between [H₂CO.H₂O]⁺ and [H₂CO.HF]⁺. (Completo, 1994)

ALBERTO PEREIRA, E. Laura Coitiño, OSCAR N. VENTURA

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 314 p.:31 - 38, 1994

Palabras clave: ab initio HF and MP2 modeling cation radical complexes effects of changing H acceptor

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Amsterdam, Holanda

ISSN: 01661280

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00222860>

Scopus' WEB OF SCIENCE™

Importance of Water in Aldol Condensation Reactions of Acetaldehyde. (Completo, 1994)

E. Laura Coitiño, JACOPO TOMASI, OSCAR N. VENTURA

Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions, v.: 90 12, p.:1745 - 1755, 1994

Palabras clave: acetaldehyde aldol condensation water as catalyst and solvent PCM localized orbital analysis

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: RSC, London, UK

ISSN: 09565000

<http://www.rsc.org/Publishing/Journals/ft/Article.asp?Type=CurrentIssue>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

Isomerization of the Formaldehyde radical cation and the failure of MP2 (Completo, 1993)

E. Laura Coitiño, OSCAR N. VENTURA

Chemical Physics Letters, v.: 202 6, p.:479 - 482, 1993

Palabras clave: formaldehyde radical cation isomerization MP2 failure

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Elsevier, Netherlands

ISSN: 00092614

<http://www.sciencedirect.com/science/journal/00092614>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

Ab Initio Study of Structure and Reactivity of H₂CO.H₂O⁺. and related radical cations (Completo, 1993)

E. Laura Coitiño, AGUSTÍ LLEDÓS, RAMÓN SERRA, JUAN BERTRÁN, OSCAR N. VENTURA

Journal of the American Chemical Society, v.: 115 20, p.:9121 - 9126, 1993

Palabras clave: radical cation complexes structure and reactivity ab initio HF and MP2 modeling

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: American Chemical Society, USA

ISSN: 00027863

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

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

Comparative Ab Initio and Semiempirical Study of Hydrogen-Bonded Complexes of Water and Ammonia. (Completo, 1992)

E. Laura Coitiño, OSCAR N. VENTURA, RAMÓN M. SOSA

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 254 p.:315 - 328, 1992

Palabras clave: Performance métodos cuánticos complejos de NH₃ y H₂O

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: Amsterdam, Holanda

ISSN: 01661280

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

Analysis of the Gas-Phase Addition of Water to Formaldehyde. A Semiempirical and Ab Initio Study of Simultaneous General Acid and Base Catalysis by H₂O. (Completo, 1992)

OSCAR N. VENTURA, E. Laura Coitiño, AGUSTÍ LLEDÓS, JUAN BERTRÁN

Journal of Computational Chemistry, v.: 13 9, p.:1037 - 1046, 1992

Palabras clave: catálisis bifuncional por agua Performance de métodos cuánticos Hidratación de aldehídos

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

Lugar de publicación: John Wiley & Sons, Inc

ISSN: 01928651

<http://www3.interscience.wiley.com/journal/33822/home?CRETRY=1&SRETRY=0>

Scopus[®] WEB OF SCIENCE™

Comparison of Semiempirical and BSSE Corrected Möller-Plesset Ab Initio Calculations on the Direct Addition of Water to Formaldehyde. (Completo, 1990)

E. Laura Coitiño, KENNETH IRVING, JOSÉ RAMA, OSCAR N. VENTURA

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 210 p.:427 - 440, 1990

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: Amsterdam, Holanda
ISSN: 01661280
<http://www.sciencedirect.com/science/journal/01661280>
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Theoretical Studies of Hydrogen-Bonded Complexes Using Semiempirical Methods (Completo, 1990)

E. Laura Coitiño, OSCAR N. VENTURA
Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 210 p.:405 - 426, 1990
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: Amsterdam, Holanda
ISSN: 01661280
<http://www.sciencedirect.com/science/journal/01661280>
Scopus® WEB OF SCIENCE™

AM1 Study of -hydrogen-Bonded Complexes of Water (Completo, 1989)

OSCAR N. VENTURA, E. Laura Coitiño, AGUSTÍ LLEDÓS, JUAN BERTRÁN
Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 177 p.:55 - 68, 1989
Palabras clave: Performance AM1 en complejos de enlace hidrógeno
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: Amsterdam, Holanda
ISSN: 01661280
<http://www.sciencedirect.com/science/journal/01661280>
Este trabajo fue el primero donde se comparó la performance de una serie de métodos generados en esa época para describir el enlace de hidrógeno en complejos de agua, reportando fortalezas y debilidades.
Scopus® WEB OF SCIENCE™

Aplicación de métodos semiempíricos derivados del MNDO a la determinación de la estructura y la reactividad de complejos de enlace de hidrógeno. (Completo, 1989)

E. Laura Coitiño, OSCAR N. VENTURA
Folia Chimica Theoretica Latina, v.: XVII p.:191 - 223, 1989
Palabras clave: Métodos semiempíricos Sistemas con enlace de hidrógeno modelado estructura y reactividad
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: CSIC, Madrid, España
ISSN: 03784843
DOI: [No tiene, dejó de editarse en 2000](https://doi.org/10.1016/0378-4843(89)90001-1)
<http://www.latindex.unam.mx/buscador/ficRev.html?opcion=1&folio=6821>
La revista se editó entre 1973 y 2000. Con frecuencia trimestral publicaba resúmenes de trabajos ya publicados de miembros de la Sociedad Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, y trabajos originales de puesta a punto en temas de relevancia e impacto en el área, los cuales eran referenciados. En particular este trabajo original de revisión recibió en 1992 el premio al mejor trabajo publicado en el bienio 1989-1991.

NO ARBITRADOS

POLYRATE: A Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics (version 7.3.1) (Completo, 1997)

ROZEEANNE STECKLER, YAO-YUAN CHUANG, PATTON L. FAST, E. Laura Coitiño, JOSÉ C. CORCHADO, DONALD G. TRUHLAR

Quantum Chemistry Exchange Program bulletin, v.: 17 p.:34 - 36, 1997
Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Papel
Lugar de publicación: Bloomington, Indiana, USA
ISSN: 08897514
<http://205.247.101.11:90/kids/1900,1928/search/aQuantum+Chemistry+Program+Exchange./aquantu>

LIBROS

Polyrate 2015 - Manual (Libro publicado Texto integral , 2015)

E. Laura Coitiño , TRUHLAR, D.G.
Número de volúmenes: 1
Número de páginas: 592
Edición: ,
Editorial: , Minneapolis
Tipo de publicación: Material didáctico
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Cinética
Medio de divulgación: Internet
ISSN/ISBN:
http://comp.chem.umn.edu/polyrate/150128_Manual_for_POLYRATE2015.pdf
Jingjing Zheng, Shuxia Zhang, Benjamin J. Lynch, José C. Corchado, Yao-Yuan Chuang, Patton L. Fast, Wei-Ping Hu, Yi-Ping Liu, Gillian C. Lynch, Kiet A. Nguyen, Charles F. Jackels, Antonio Fernandez Ramos, Benjamin A. Ellingson, Vasilios S. Melissas, Jordi Villà, Ivan Rossi, Elena. L. Coitiño, Jingzhi Pu, Titus V. Albu Department of Chemistry Chemical Theory Center, and Supercomputing Institute University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota 55455 Artur Ratkiewicz Institute of Chemistry University of Bialystok, Poland Rozeanne Steckler Northwest Alliance for Computational Science & Engineering Oregon State University, Corvallis, Oregon 97331 Bruce C. Garrett Environmental Molecular Sciences Laboratory Pacific Northwest National Laboratory, Richland, Washington 99352 Alan D. Isaacson Department of Chemistry and Biochemistry Miami University, Oxford, Ohio 45056 and Donald G. Truhlar Department of Chemistry, Chemical Theory Center, and Supercomputing Institute University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota 55455

Fisicoquímica Moderna para Ciencias de la Vida - Manual de Laboratorio Computacional (Libro publicado Texto integral , 2010)

E. Laura Coitiño , M. KÖNCKE , A. PITTINI
Edición: ,
Editorial: ,
Palabras clave: Fisicoquímica Moderna Mecánica y Química Cuántica Espectroscopía Molecular fundamental Termodinámica Estadística
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Fisicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos
Medio de divulgación: Papel
ISSN/ISBN:
en construcción
Proyecto institucional seleccionado como prioritario en Facultad de Ciencias en 2009. Apoyado en 2010 por la Comisión Sectorial de Enseñanza para actualizar y publicar el texto en formato papel y digital (DVD). En estos momentos se encuentra en proceso de actualización y revisión del material, estando prevista la entrega del mismo a diciembre 2010.

PUBLICACIÓN DE TRABAJOS PRESENTADOS EN EVENTOS

Caracterización teóricoexperimental de una serie de hidroxilamido-complejos de oxidovanadio(V) con co-ligandos aminoacídicos de potencial interés farmacológico (2017)

Resumen
G. ARRAMBIDE , D. GAMBINO , E. Laura Coitiño

Evento: Nacional
Descripción: Encuentro Nacional de Química - ENAQUI 5
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2017
Publicación arbitrada
Palabras clave: complejos de oxidovanadio(V)-hidroxilamido co-ligandos aminoacido modelado

computacional DFT/IEF-PCM

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Inorgánica Medicinal

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

Medio de divulgación: Internet

http://enaqui.fq.edu.uy/Resumen_Arrambide_Gabriel.pdf

Adición de tioles al ácido nitrolinoleico conjugado (2017)

Resumen

L. TURELL , D. VITTURI , E. Laura Coitiño , L. LEBRATO , M. MÖLLER , C. SAGASTI , F. SCHOPFER , B. ÁLVAREZ

Evento: Nacional

Descripción: Encuentro Nacional de Química - ENAQUI 5

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2017

Publicación arbitrada

Palabras clave: tioles acido nitrolinoleico conjugado reacciones tipo tio-Michael estudio teórico-experimental

Areas de conocimiento:

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

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

Medio de divulgación: Internet

http://enaqui.fq.edu.uy/Resumen_Turell_Lucia.pdf

Computational insights on the molecular basis of the inhibition of Prostaglandin Endoperoxide H Synthase 2 (PGHS-2 or COX-2) activity by nitroarachidonate (2017)

Resumen

A. MERLINO , L. BONILLA , A. TROSTCHANSKY , L. MARNETT , H. RUBBO , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: XLIII Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression

Ciudad: París

Año del evento: 2017

Publicación arbitrada

Palabras clave: PGHS-2 inhibition nitroarachidonate monomer vs. dimer

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

https://chitelparis2017.sciencesconf.org/data/pages/CHITEL2017Paris_Book_FINAL.pdf

Local Environments Modulating Cysteine pKa and Reactivity towards Oxidation by Hydrogen Peroxide (2017)

Resumen

E. Laura Coitiño , STEPHANIE PORTILLO , J. BONANATA

Evento: Internacional

Descripción: XLIII Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression

Ciudad: París

Año del evento: 2017

Publicación arbitrada

Escrita por invitación

Palabras clave: Cysteine pKa and reactivity modulating environments protein Cys oxidation by H₂O₂

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Orientando el estudio de nuevas variantes génicas en la enfermedad de von Hippel-Lindau mediante aplicación de herramientas de modelado molecular (2017)

Resumen

C. MATHÓ , A. MERLINO , G. SANSÓ , P. PENNISI , E. Laura Coitiño

Evento: Nacional

Descripción: Congreso Nacional de Biociencias

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2017

Publicación arbitrada

Palabras clave: von Hippel-Lindau pVHL mutantes complejos VBC-HIF

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Bioinformática Estructural, Modelado computacional

Medio de divulgación: Internet

[http://opc.biociencias.gegamultimedios.net/opc/index.php?](http://opc.biociencias.gegamultimedios.net/opc/index.php?page=buscarProgramaExtendido&key=NDQ=)

[page=buscarProgramaExtendido&key=NDQ=](http://opc.biociencias.gegamultimedios.net/opc/index.php?page=buscarProgramaExtendido&key=NDQ=)

Sulfenic acid or sulfenate? A matter of protein environment and water access in oxidized Cysteine sites of physiological relevance (2017)

Resumen

E. Laura Coitiño , J. BONANATA , STEPHANIE PORTILLO

Evento: Internacional

Descripción: 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists

Ciudad: Munich

Año del evento: 2017

Anales/Proceedings: WATOC 2017 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists Book of Abstracts

Escrita por invitación

Palabras clave: peroxiredoxin 5 Cys47 oxidationalbumin Cys34 oxidation sulfenic/sulfenate derivatives in proteins

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Internet

http://www.watoc2017.com/files/WATOC17/Downloads/Book_of_Abstracts_final.pdf

Síntesis, caracterización y evaluación de actividad anti-proliferativa de complejos [RuCp(X)(L)(PTA)] solubles en agua con X = Ade/Gua/Teofilina y L = PPh3/PTA (2017)

Resumen

E. Laura Coitiño , LAZHAR HAJJI , CRISTÓBAL SARAIBA-BELLO , GASPAR SEGOVIA-TORRENTE , MANUEL SERRANO-RUIZ , ANTONIO ROMEROSA , A. CANNELLA

Evento: Nacional

Descripción: ENAQUI 5 - 5to Encuentro Nacional de Química

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2017

Anales/Proceedings: 5º Encuentro Nacional de Química - ENAQUI 5 - Posters Sesión I

Publicación arbitrada

Palabras clave: Anticancerígenos solubles de Ru integración teoría-experimento estructura y propiedades fisicoquímicas

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química

Medicinal Inorgánica

Medio de divulgación: Internet

http://enaqui.fq.edu.uy/Resumen_Coitino_Laura.pdf

Trabajo en cooperación tripartita entre LQTC-IQB, FCIEN, UdelaR, Universidad de Almería, España y Dpto. di Biochimica e Biologia Molecolare, Università di Ferrara, Italia

Insights into the Mechanism of Peroxiredoxin 6 Sulfenic Acid reduction by Ascorbate (2017)

Resumen

S. PORTILLO-LEDESMA , G. FERRER-SUETA , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: SfrBM 2017 - Society for Redox Biology & Medicine' 24th Annual Meeting

Ciudad: Baltimore, Maryland

Año del evento: 2017
Anales/Proceedings:SfRBM 2017 SfRBM's 24th Annual Meeting Program and Abstracts
November 29 - December 2, 2017 Hilton Baltimore Baltimore, MD USA
Volumen:112
Pagina inicial: 31
Pagina final: 31
ISSN/ISBN: 0891-5849
Publicación arbitrada
Editorial: Elsevier
Palabras clave: Computational modeling sulfenic acid reduction ascorbate as reductor
peroxiredoxin 6 C47 thiol
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado de mecanismos de tioles proteicos
Medio de divulgación: Internet
DOI: [10.1016/j.freeradbiomed.2017.10.036](https://doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2017.10.036)
<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0891584917308201>

Conjugated Nitrolinoleic Acids as Endogenous PPAR γ Regulators: Michael Addition to Biothiols and Interactions to the Protein Ligand Binding Domain (2017)

Resumen
AC, S. PORTILLO-LEDESMA, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: ESPCA - Biophysical Methods to Study Biomolecular Interactions
Ciudad: Sao Paulo, Brasil
Año del evento: 2017
Anales/Proceedings:ESPCA - Biophysical Methods to Study Biomolecular Interactions
Publicación arbitrada
Palabras clave: NO₂FA Interactions with thiols thiol-Michael reaction
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica y Bioquímica
Computacional
Medio de divulgación: Papel
ESPCA - Biophysical Methods to Study Biomolecular Interactions

The microenvironment of the sulfenic acid of human serum albumin: In search of clues for explaining its spontaneous decay (2017)

Resumen
E. Laura Coitiño, J. Bonanata, B. Alvarez

Evento: Internacional
Descripción: SfRBM 2017 SfRBM's 24th Annual Meeting
Ciudad: Baltimore, USA
Año del evento: 2017
Anales/Proceedings:Free Radicals in Biology and Medicine -SfRBM 2017 SfRBM's 24th Annual Meeting Program and Abstracts
Volumen:112
Serie: Supplement 1
Pagina inicial: 19
Pagina final: 20
Publicación arbitrada
Editorial: Elsevier
Palabras clave: Sulfenic acid Albumin Spontaneous decay product Computational modeling
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática estructural
Medio de divulgación: Internet
DOI: [10.1016/j.freeradbiomed.2017.10.015](https://doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2017.10.015)
Financiación/Cooperación:
Facultad de Ciencias - UDeLaR / Otra, Uruguay
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0891584917307992>

Insights into the Mechanism of Peroxiredoxin 6 Sulfenic Acid reduction by Ascorbate (2017)

Resumen
E. Laura Coitiño, S. Portillo, G. Ferrer-Sueta

Evento: Internacional
Descripción: SfrBM 2017 SfrBM's 24th Annual Meeting
Ciudad: Baltimore, USA
Año del evento: 2017
Anales/Proceedings: Free Radicals in Biology and Medicine - SfrBM 2017 SfrBM's 24th Annual Meeting Program and Abstracts
Volumen: 112
Fascículo: 1
Serie: Supplement 1
Página inicial: 31
Página final: 31
Publicación arbitrada
Editorial: Elsevier
Palabras clave: peroxiredoxin 6; ascorbate antioxidant mechanism computational modeling
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática estructural
Medio de divulgación: Internet
DOI: [10.1016/j.freeradbiomed.2017.10.036](https://doi.org/10.1016/j.freeradbiomed.2017.10.036)
Financiación/Cooperación:
Comisión Sectorial de Investigación Científica - UDeLaR / Apoyo financiero, Uruguay
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0891584917308201>

Thio-Michael addition of biothiols to conjugated nitrolinoleic acids (NO2CLA): experiment-theory interplay for explaining a bifasic kinetics (2016)

Resumen

E. Laura Coitiño, L. TURELL, D. VITTURI, B. ÁLVAREZ, F. SCHOPFER

Evento: Internacional
Descripción: Quitel2016: XLII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2016
Publicación arbitrada
Palabras clave: Nitrolinoleico conjugado mecanismo tio-Michael Modelo QM
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional QM de mecanismos de reacción
Medio de divulgación: Internet
<http://quitel2016.org.uy/en/contributed-telk-coitino-laura/>

Modulating the Reactivity of Biological Thiols and the Mechanism of Reaction with H₂O₂ by Hydrogen Bonding in Their Local Environments (2016)

Resumen

STEPHANIE PORTILLO, J. BONANATA, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: 56th Sanibel Symposium
Ciudad: St. Simons Island
Año del evento: 2016
Anales/Proceedings: 56th Sanibel Symposium
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de proteínas, QM/MM, dinámica molecular
Medio de divulgación: Internet
http://www.qtp.ufl.edu/sanibel/Abstracts/2016/Oral%20Contributed/Coniti%C3%B1o_Laura.pdf
El financiamiento parcial solicitado a CSIC-UdelaR está en proceso de evaluación en este momento. No se tiene certeza aún de contar con el mismo y sus montos, aunque no habiendo pedido apoyos en 2015, se espera obtenerlo.

Modeling the Interaction of Oleic Acid with two α -Lactalbumin Folding Variants: in Route towards Deciphering the Molecular Basis of HAMLETs Antitumoral Activity (2016)

Resumen

F. KLEIN, FLORENCIA FERRARO, A. MERLINO, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: 56th Sanibel Symposium

Ciudad: St. Simons Island, GA, USA
Año del evento: 2016
Anales/Proceedings: 56th Sanibel Symposium
Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de proteínas, QM/MM, dinámica molecular

Medio de divulgación: Internet

http://www.qtp.ufl.edu/sanibel/Abstracts/2016/Poster/Coiti%C3%B1o_Laura%20POSTER.pdf

El pedido apoyo financiero a CSIC-UdelaR se encuentra en evaluación por parte de dicho organismo, por lo que al presente se desconoce si se obtendrá y en que magnitud. No habiendo solicitado apoyos a CSIC durante 2014, y trabajando en régimen de Dedicación Total a la UdelaR, es de esperar que el mismo se obtenga. El resto del financiamiento es provisto por la partida central especial del régimen de DT de la expositora.

En route to decipher the molecular basis of HAMLETs antitumoral activity: a comparison of α -Lactalbumin interactions with oleic and stearic acids (2016)

Resumen

F. FERRARO , F. KLEIN , A. MERLINO , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression, QUITEL 2016

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2016

Publicación arbitrada

Palabras clave: HAMLET Oleic acid Lactalbumin

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de estructura de complejos ligando-proteína

Medio de divulgación: Internet

Exploring the nature of the catalytic mechanism of a soluble NADH-dependent Fumarate Reductase from Trypanosoma cruzi (2016)

Resumen

S. SASTRE , A. MERLINO , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression, QUITEL 2016

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2016

Publicación arbitrada

Palabras clave: Catalytic mechanism Fumarate reductase T. cruzi

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional DFT-PCM de mecanismos de reacción

Medio de divulgación: Internet

pKas of the catalytic cysteine residues of human peroxiredoxin 5 (2016)

Resumen

S. PORTILLO , G. FERRER-SUETA , A. ROITBERG , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression, QUITEL 2016

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2016

Publicación arbitrada

Palabras clave: Cys pKa constant pH MD Peroxiredoxin5

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado de pKa de residuos proteicos por cpH-MD

Medio de divulgación: Internet

Comparison between Additive and Subtractive QM/MM Schemes on the Reaction of Cys34 Sulfenate of HSA with H₂O₂ (2016)

Resumen

J. BONANATA , J. M. LLUCH , A. GONZÁLEZ-LAFONT , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression, QUITEL2016
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2016
Publicación arbitrada
Palabras clave: Albúmina sérica Oxidación por H₂O₂
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado computacional QM/MM de mecanismos de reacción en proteínas
Medio de divulgación: Internet
<http://quitel2016.org.uy/en/contributed-talk-bonanata-jenner/>
PEDECIBA-Química

QM/MM (ONIOM) study of the reaction catalyzed by ethanolamine ammonia lyase (2016)

Resumen
J. BONANATA, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: 10th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications
Ciudad: Castelló de la Plana
Año del evento: 2016
Publicación arbitrada
Palabras clave: H abstraction Ethanolamine utilization
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado computacional de estructura y propiedades de moléculas y
macromoléculas
Medio de divulgación: Papel
PEDECIBA-Química

Reactivity trends in a series of biothiols towards their Michael addition on a model of conjugated nitrolinoleic acid (2016)

Resumen
A. CANTOU, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression, QUITEL2016
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2016
Palabras clave: DFT-PCM nitrolinoleic acid Thio-Michael reaction
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado computacional QM de mecanismos de reacción
Medio de divulgación: Internet

Modeling the catalytic cycle of the atypical 2-Cys PRDX5: roles of active-site residues and folding (2015)

Resumen
PORTILLO-LEDESMA, S., FERRER-SUETA, G., E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology
Ciudad: Salto, Uruguay
Año del evento: 2015
Anales/Proceedings: Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology 2015
ISSN/ISBN: 978-987-27591-
Publicación arbitrada
Escrita por invitación
Palabras clave: Mecanismos enzimáticos Biofísica Computacional eficiencia catalítica
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Computacional, Bioinformática Estructural
Medio de divulgación: Papel
<http://masbiofísica.fcien.edu.uy/latin-american-crosstalk-in-biophysics-sbf-uy-sab>

In silico Approach to Human Serum Albumin (HSA) Early Glycation Mechanism (2015)

Resumen
F. ORTIZ , J. BONANATA , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology (SBF.uy-SAB)
Ciudad: Salto Grande, Salto, Uruguay
Año del evento: 2015
Anales/Proceedings: Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology. SBF.uy-SAB
Publicación arbitrada
Palabras clave: glicación de albúmina Biofísica de proteínas PTMs por glucosa en Lys195
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado computacional sistemas interés biológico, QM/MM, dinámica
molecular
Medio de divulgación: Internet
<http://masbiofisica.fcien.edu.uy/latin-american-crosstalk-in-biophysics-sbf-uy-sab>

Histone H1's Lys/Arg Glycation: Structural Consequences and Synergy with Oxidation (2015)

Resumen
F. KLEIN , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology (SBF.uy-SAB)
Ciudad: Salto Grande, Salto, Uruguay
Año del evento: 2015
Anales/Proceedings: Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology (SBF.uy-SAB)
Publicación arbitrada
Palabras clave: Biofísica de proteínas Sinergia glicación-oxidación en histonas PTM por D-ribosa y
metilglioxal
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado computacional de proteínas, QM/MM, dinámica molecular
Medio de divulgación: Internet
<http://masbiofisica.fcien.edu.uy/latin-american-crosstalk-in-biophysics-sbf-uy-sab>

Effects of Cys34 S-cysteinylation on the Tendency to Glycate of Arg/Lys Residues in Human Serum Albumin (2015)

Resumen
J. BONANATA , B. ÁLVAREZ , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology (SBF.uy-SAB)
Ciudad: Salto Grande, Salto, Uruguay
Año del evento: 2015
Anales/Proceedings: Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology. SBF.uy-SAB
Publicación arbitrada
Palabras clave: glicación de albúmina Biofísica de proteínas cisteinilación del tiol Cys34 de albúmina
humana
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado computacional de proteínas, QM/MM, dinámica molecular
Medio de divulgación: Internet
<http://masbiofisica.fcien.edu.uy/latin-american-crosstalk-in-biophysics-sbf-uy-sab>

H2O2 reduction mechanism and the competition between resolution and overoxidation in human peroxiredoxin-5 (2015)

Resumen
STEPHANIE PORTILLO , E. Laura Coitiño , G. FERRER-SUETA

Evento: Internacional
Descripción: 2nd International Symposium: Thiol metabolism and Redox Regulation of Cellular
Functions
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2015
Anales/Proceedings: E-BOOK 2nd International Symposium: Thiol metabolism and Redox
Regulation of Cellular Functions
Publicación arbitrada

Palabras clave: reaction mechanism ONIOM QM/MM kinetics

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Effects of glycation of human serum albumin on the properties of its free thiol: A computational study (2015)

Resumen

J. BONANATA, B. ÁLVAREZ, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: Elena Laura Coitiño Izaguirre

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Anales/Proceedings: E-BOOK 2nd International Symposium: Thiol Metabolism and Redox

Regulation of Cellular Functions

Publicación arbitrada

Palabras clave: albumin glycation molecular dynamics simulations cystein thiol properties

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

Protein Sulfenic Derivatives in a Redox Crossroad: Mechanistic Insights from Representative Models of Oxidation by H₂O₂ and Reduction by Ascorbate (2015)

Resumen

J. BONANATA, STEPHANIE PORTILLO, B. ÁLVAREZ, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: 2nd International Symposium: Thiol metabolism and Redox Regulation of Cellular Functions

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Anales/Proceedings: E-BOOK 2nd International Symposium: Thiol Metabolism and Redox

Regulation of Cellular Functions

Publicación arbitrada

Palabras clave: Computational modeling Sulfenic acid reactivity Reduction by ascorbate Oxidation by H₂O₂

Areas de conocimiento:

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

Study of the Fully Folded-Locally Unfolded Transition and the Resolution Step in Human Peroxiredoxin 5 (2015)

Resumen

STEPHANIE PORTILLO, D. VÁZQUEZ, J. SANTOS, E. Laura Coitiño, G. FERRER-SUETA

Evento: Internacional

Descripción: 23rd Congress of the Internatl. Union for Biochemistry & Molecular Biol. (IUBMB) & 44th Annual Meeting of the Brazilian Society for Biochemistry and Mol. Biol.

Ciudad: Foz de Iguacu, PR, Brasil

Año del evento: 2015

Anales/Proceedings: 23rd IUBMB Congress & 44th Annual Meeting SBBq

Publicación arbitrada

Palabras clave: Molecular simulations of Protein folding Peroxiredoxin 5 FF-LU transition

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional sistemas interés biológico, QM/MM, dinámica molecular

Medio de divulgación: Internet

<http://www.sbbq.org.br/iubmb2015/cdrom/indiceautor.htm#Cx>

x

Aromatic amine N-oxide organometallic compounds: searching for prospective agents against Trypanosoma cruzi. (2015)

Resumen

E. RODRÍGUEZ, F. MOSQUILLO, L. PÉREZ-DÍAZ, GA, ECHEVERRÍA, O.E. PIRO, A. MERLINO, E.

Laura Coitiño , L. OTERO , D. GAMBINO

Evento: Regional

Descripción: 5o. Simposio Latinoamericano de Química de Coordinación y Organometalica - 5o. SILQCOM

Ciudad: Angra dos Reis, Brasil

Año del evento: 2015

Publicación arbitrada

Palabras clave: N-oxide Pt/Pd anti-T. cruzi speciesDFT-PCM characterization Fumarate Reductase Molecular Docking

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional sistemas interés biológico, QM/MM, dinámica molecular

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Inorgánica Medicinal

Medio de divulgación: Internet

http://www.silqcom2015.com.br/arquivos/track1_full_1.pdf

Derivados de ferroceno de un N-óxido de amina aromática: búsqueda de potenciales agentes contra Trypanosoma cruzi (2015)

Resumen

E. RODRÍGUEZ ARCE , M.F. MOSQUILLO , L. PÉREZ-DÍAZ , G. ECHEVERRÍA , O. E. PIRO , A. MERLINO , E. Laura Coitiño , L. OTERO , D. GAMBINO

Evento: Nacional

Descripción: 4to Encuentro Nacional de Química (ENAQUI) 2015

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2015

Anales/Proceedings:Cuarto Encuentro Nacional de Química

Página inicial: 55

Página final: 55

Publicación arbitrada

Palabras clave: Compuestos de Pt/Pd anti-T. cruzi Inhibición de Fumarato Reductasas Mecanismo de acción

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional sistemas interés biológico, QM/MM, dinámica molecular

Medio de divulgación: Internet

<http://www.enaqui4.fq.edu.uy/>

Shedding light on the interaction mode of fatty acid nitroalkenes as agonists of the nuclear receptor PPAR γ (2014)

Resumen

E. Laura Coitiño , A. M. FERREIRA , H. RUBBO , V. VEROLI

Evento: Internacional

Descripción: 10th Triennial Conference of the World Association of Theoretical and Computational Chemists WATOC 2014,

Ciudad: Santiago de Chile, Chile

Año del evento: 2014

Anales/Proceedings:WATOC Abstract Book

Publicación arbitrada

Palabras clave: Interacción Nitroalquenos de ácidos grasos-PPAR

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

<http://watoc2014.com/website/abstract-book/>

In silico studies of Histone H1s early glycation by Ribose/Adenosine diphosphate (ADP)- ribose and its synergy with protein oxidation (2014)

Resumen

F. KLEIN , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: 10th Triennial Conference of the World Association of Theoretical and Computational Chemists WATOC 2014,
Ciudad: Santiago de Chile, Chile
Año del evento: 2014
Anales/Proceedings:WATOC Abstract Book
Publicación arbitrada
Palabras clave: glicación de Histona H1 por ribosa
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional
Medio de divulgación: Internet
<http://watoc2014.com/website/abstract-book/>

Modeling the reaction mechanism of sulfenic acid oxidation by hydrogen peroxide (2014)

Resumen

J. BONANATA , B. ÁLVAREZ , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: 10th Triennial Conference of the World Association of Theoretical and Computational Chemists WATOC 2014,
Ciudad: Santiago de Chile, Chile
Año del evento: 2014
Anales/Proceedings:WATOC Abstract Book
Publicación arbitrada
Palabras clave: Reactividad del tiol de albúmina
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional
Medio de divulgación: Internet
<http://watoc2014.com/website/abstract-book/>

Stability and Dynamics of VBC-HIF Complexes under Normoxic and Hipoxic conditions (2014)

Resumen

A. MERLINO , C. MATHÓ , G. SANSÓ , P. PENNISI , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: 10th Triennial Conference of the World Association of Theoretical and Computational Chemists WATOC 2014,
Ciudad: Chile
Año del evento: 2014
Anales/Proceedings:W
Publicación arbitrada
Palabras clave: reconocimiento multiproteínas interacción pVHL-HIF-1alfa
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional
Medio de divulgación: Internet
<http://watoc2014.com/website/abstract-book/>

Unveiling the role of Threonine44 in the catalytic mechanism of human Peroxiredoxin 5 (2014)

Resumen

STEPHANIE PORTILLO , G. FERRER-SUETA , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: 10th Triennial Conference of the World Association of Theoretical and Computational Chemists WATOC 2014,
Ciudad: Santiago de Chile, Chile
Año del evento: 2014
Anales/Proceedings:WATOC Abstract Book
Publicación arbitrada
Palabras clave: Efectos de mutación T44V en peroxiredoxina V
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional
Medio de divulgación: Internet
<http://watoc2014.com/website/abstract-book/>

Ciudad: Santiago de Chile, Chile
Año del evento: 2014
Anales/Proceedings: WATOC Abstract Book
Publicación arbitrada
Palabras clave: Puntos de bifurcación post-TS
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional
Medio de divulgación: Internet
<http://watoc2014.com/website/abstract-book/>

Human serum albumin thiol pKa and mechanism of oxidation by hydrogen peroxide: a mixed experimental and computational approach (2013)

Resumen
J. BONANATA, B. ÁLVAREZ, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: VIII Meeting of the Society of Free Radical Biology and Medicine- South American Group Meeting
Ciudad: Buenos Aires
Año del evento: 2013
Anales/Proceedings: VIII Meeting of the Society Free Radical Biology and Medicine-South American Group (VIII SFRBM-SAG)
Publicación arbitrada
Palabras clave: modelado QM/MM y MD de proteínas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado de la reactividad, cinética y espectros IR de proteínas
Medio de divulgación: Papel
http://www.oxyclubcalifornia.org/SFRBM_SA/;
<http://viiiisfrbmsaregistration.senixsolutions.com.ar/pdf>

Structural and energetic aspects of peroxiredoxin 5 catalysis, an experimental and computational approach (2013)

Resumen expandido
STEPHANIE PORTILLO, E. Laura Coitiño, G. FERRER-SUETA

Evento: Internacional
Descripción: VIII Meeting of the Society of Free Radical Biology and Medicine- South American Group Meeting
Ciudad: Buenos Aires
Año del evento: 2013
Anales/Proceedings: VIII Meeting of the Society of Free Radical Biology and Medicine- South American Group Meeting
Publicación arbitrada
Palabras clave: eficiencia catalítica en peroxiredoxinas reducción de tior por H₂O₂
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado de la reactividad, pKa y cinética de tioles en proteínas
Medio de divulgación: Papel
http://viiiisfrbmsaregistration.senixsolutions.com.ar/pdf/POSTERS_SFRBM-SAG.pdf

Estabilidad y dinámica de los complejos VBC-HIF-1 α en condiciones de normoxia e hipoxia (2013)

Resumen
C. MATHÓ, A. MERLINO, G. SANSÓ, P. PENNISI, E. Laura Coitiño

Evento: Nacional
Descripción: 2das Jornadas + Biofísica
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2013
Anales/Proceedings: Libro de Resúmenes - Segundas Jornadas + Biofísica 2013
Publicación arbitrada
Palabras clave: complejo multiproteico VBC-HIF Energía de interacción en hipoxia/normoxia Integración Termodinámica+MD
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Integración termodinámica - Simulación MD

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

Medio de divulgación: Papel

masbiofisica.fcien.edu.uy

Trabajo integrado a la tesis doctoral de la M.Sc. Cecilia Mathó, desarrollada en Argentina en los aspectos experimentales. La labor de modelado se realiza 100% en cooperación con el LQTC- Facultad de Ciencias - Udelar

Sentando las bases para caracterizar in silico el mecanismo de reducción de [PtIV(NH₃)₂Cl₄] por tioles biológicos (2013)

Resumen

I. MASTANDREA, E. Laura Coitiño

Evento: Nacional

Descripción: Segundas Jornadas +biofísica

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2013

Anales/Proceedings: Libro de Resúmenes - Segundas Jornadas +Biofísica 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: Modelado DFT/PCM Compuestos anticancerígenos de PtIV Reducción PtIV-PtII por tioles

Áreas de conocimiento:

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

masbiofisica.fcien.edu.uy

SOBREOXIDACIÓN DE TIOLES BIOLÓGICOS: Estudio Computacional de la reacción de sulfenato (RSO) CON H₂O₂ (2013)

Resumen

J. BONANATA, B. ÁLVAREZ, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: 3er Encuentro Nacional de Ciencias Químicas, ENAQUI 3.0

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2013

Anales/Proceedings: 3er Encuentro Nacional de Ciencias Químicas, ENAQUI 3.0

Publicación arbitrada

Palabras clave: Sobreoxidación de tioles proteicos por H₂O₂

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado de la reactividad y cinética de tioles en proteínas

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

Medio de divulgación: Papel

<http://flavors.me/3enaqui>; https://docs.google.com/file/d/0B33a5N-UESC_aTdXWW12TINaSjQ/edit

Elucidación del mecanismo de sobreoxidación de la albúmina sérica humana por H₂O₂ por modelado computacional y FTIR (2013)

Resumen

J. BONANATA, B. ÁLVAREZ, E. Laura Coitiño

Evento: Nacional

Descripción: Segundas Jornadas +biofísica

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2013

Anales/Proceedings: Libro de Resúmenes - Segundas Jornadas +Biofísica 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: modelado QM/MM y MD de proteínas Sobreoxidación de HSA por H₂O₂ FTIR

Áreas de conocimiento:

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Espectroscopía FTIR, Cinética

Medio de divulgación: Papel

masbiofisica.fcien.edu.uy

Reactividad comparada de residuos Lys de Histona H1 y su modificación post-traducción por glicación con ribosa

(2013)

Resumen

F. KLEIN , E. Laura Coitiño

Evento: Nacional

Descripción: Segundas Jornadas +biofísica

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2013

Anales/Proceedings: Libro de Resúmenes - Segundas Jornadas +Biofísica 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: mecanismo de reacción Glicación de proteínas Histona H1

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Espectroscopía FTIR, Cinética

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

Medio de divulgación: Papel

masbiofisica.fcien.edu.uy

Trabajo premiado con Mención entre los 5 mejores posters del evento, defendido por Florencia

Klein

Modelado del dominio central de fumarato reductasas de T. cruzi y L. major: perspectivas para el diseño de inhibidores (2013)

Resumen

A. MERLINO , E. Laura Coitiño

Evento: Nacional

Descripción: Segundas Jornadas +biofísica

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2013

Anales/Proceedings: Libro de Resúmenes - Segundas Jornadas +Biofísica 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: Fumarato Reductasas Estructura del sitio activo interacción cofactor/sustrato

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Medio de divulgación: Papel

masbiofisica.fcien.edu.uy

Modelos de la interacción nitrolípidos- PPARγ: aportes para la comprensión y predicción de su capacidad agonista (2013)

Resumen

V. VEROLI , M- LAMAS, A. M. FERREIRA , E. Laura Coitiño

Evento: Nacional

Descripción: Segundas Jornadas +biofísica

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2013

Anales/Proceedings: Libro de Resúmenes - Segundas Jornadas +Biofísica 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: modelado QM/MM y MD de proteínas nitrolípidos - interacción con PPARγ

activación de PPAR

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

Medio de divulgación: Papel

masbiofisica.fcien.edu.uy

Reorganización Estructural del sitio activo de Prx5 disparada por la desprotonación de Cys47 (2013)

Resumen

S. PORTILLO-LEDESMA , G. FERRER-SUETA , E. Laura Coitiño

Evento: Nacional

Descripción: Segundas Jornadas +biofísica

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2013

Anales/Proceedings: Libro de Resúmenes - Segundas Jornadas + Biofísica 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: modelado QM/MM y MD de proteínas PrxV WT y mutantes

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

Medio de divulgación: Papel

masbiofisica.fcien.edu.uy

Insights into the reaction mechanism of hydrogen peroxide reduction by human peroxiredoxin 5: an ONIOM QM/MM and MD study (2013)

Resumen

S. PORTILLO-LEDESMA, B. KNOOPS, G. FERRER-SUETA, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: XVIII International Workshop Quantum Systems in Chemistry, Physics & Biology

Ciudad: Paraty, Rio de Janeiro, Brasil

Año del evento: 2013

Anales/Proceedings: Libro de Resúmenes - XVII QSCP 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: modelado QM/MM y MD de proteínas Peroxiredoxina 5 Mecanismo de oxidación del tiol por H₂O₂

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

Medio de divulgación: Papel

<http://www.qscp2013.iq.ufrj.br/index.php>

MODULATION OF REACTIVITY AND BINDING OF UNSATURATED FATTY ACIDS BY NITRATION AND THEIR ENVIRONMENT (2013)

Resumen

M.V. VEROLI, S. PORTILLO-LEDESMA, A. TROTSCHANSKY, H. RUBBO, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: XVIII International Workshop Quantum Systems in Chemistry, Physics & Biology

Ciudad: Paraty, Rio de Janeiro, Brasil

Año del evento: 2013

Anales/Proceedings: Libro de Resúmenes - XVIII QSCP 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: modelado QM/MM y MD de proteínas Modelado DFT/PCM de nitrolípidos

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

Medio de divulgación: Papel

<http://www.qscp2013.iq.ufrj.br/index.php>

INSIGHTS INTO THE BINDING MODE OF 14-NO₂AA TO PGHS-1 AND PGHS-2: CLUES FROM MOLECULAR DYNAMICS SIMULATIONS TO PROPOSE INHIBITORY MECHANISMS (2013)

Resumen expandido

A. MERLINO, N. BRAS, M. J. RAMOS, H. RUBBO, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: Simposio Brasileiro de Química Teórica

Ciudad: Angra dos Reis, RJ, Brasil

Año del evento: 2013

Anales/Proceedings: Libro de Resúmenes - SBQT 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: Simulaciones de dinámica molecular Inhibición de PGHS-1/PGHS-2 Interacción inhibidor-proteína

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática

Medio de divulgación: Papel

<http://sbqt2013.net.br/>

Modulating Reactivity at the Peroxidatic Cysteine in Human Peroxiredoxin V (2013)

Resumen

STEPHANIE PORTILLO , B.KNOOPS , G. FERRER-SUETA , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: International Symposium on Organic Reaction Mechanisms

Ciudad: Shenzhen, China

Año del evento: 2013

Publicación arbitrada

Palabras clave: mecanismo de reacción Peroxiredoxina 5 cinética y pKa

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Modelado computacional de enzimas y su mecanismo

Medio de divulgación: Papel

Characterizing Lys/Arg Reactivity and Binding Features of β -Amyloid Peptide Variants Relevant to Alzheimers Disease (2012)

Resumen

L. MININI , MERLINO , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: XVII QUITEL - Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: Natal, RN, Brasil

Año del evento: 2012

Anales/Proceedings:XVII QUITEL - Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Publicación arbitrada

Palabras clave: Glicación beta amiloide Alzheimer ONIOM QM:QM

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Biológica

Medio de divulgación: CD-Rom

<http://www.quitel2012.com/>

Insights on the ethanolamine ammonia-lyase catalysis: strong pull-effect by Glu287 and NH3+-protein H-bond network as puppeteers of substrates transformation (2012)

Resumen

BONANATA , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: XVII QUITEL - Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: Natal, RN, Brasil

Año del evento: 2012

Anales/Proceedings:XVII QUITEL - Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Publicación arbitrada

Palabras clave: etanolamina amonio liasa mecanismo de reacción ONIOM QM/MM

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Biológica

Medio de divulgación: CD-Rom

<http://www.quitel2012.com/>

Molecular Mechanisms for the Reaction Between .OH Radicals and Proline: Insights on the Role as ROS Scavenger in Plant Stress (2012)

Resumen

SIGNORELLI, S. , E. Laura Coitiño , O. BORSANI , J. MONZA

Evento: Internacional

Descripción: XVII QUITEL - Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: Natal, RN, Brasil

Año del evento: 2012

Anales/Proceedings:XVII QUITEL - Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Publicación arbitrada

Palabras clave: OH scavenger H abstraction Pro and derivatives DFT/PCM modeling

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Biológica
Medio de divulgación: CD-Rom

ESTRUCTURA Y RECONOCIMIENTO MOLECULAR PARA UNA NUEVA VARIANTE (L163R) DE LA PROTEINA von HIPPEL-LINDAU (pVHL) (2012)

Resumen

C. MATHÓ , A. MERLINO , G. SANSÓ , E. Laura Coitiño , P. PENNISI

Evento: Internacional

Descripción: XXIII Reunión Anual Sociedad Latinoamericana de Endocrinología Pediátrica (SLEP)

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2012

Anales/Proceedings: XXIII Reunión Anual Sociedad Latinoamericana de Endocrinología Pediátrica (SLEP)

Publicación arbitrada

Palabras clave: complejo multiproteico VBC-HIF variantes génicas pVHL modelado y simulación AMBER

Áreas de conocimiento:

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

Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular / Enfermedad de von Hippel-Lindau

Medio de divulgación: CD-Rom

www.slep2012.com

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 (2012)

Resumen

A. MERLINO , M. VIEITES , D. GAMBINO , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Piriápolis, Uruguay

Año del evento: 2012

Anales/Proceedings: XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Publicación arbitrada

Palabras clave: Inhibición Fumarato Reductasas T. cruzi & L. Major Homología, docking y MD

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de proteínas y sus interacciones

Medio de divulgación: Papel

<http://www.biociencias.org.uy/>

Catálisis enzimática de la peroxirredoxina V: mecanismo de reacción y función de los residuos conservados Thr44 y Arg127 (2012)

Resumen

STEPHANIE PORTILLO , B. KNOOPS , G. FERRER-SUETA , E. Laura Coitiño

Evento: Nacional

Descripción: XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Piriápolis, Uruguay

Año del evento: 2012

Publicación arbitrada

Palabras clave: Peroxirredoxina 5 Mecanismo de oxidación del tiol por H₂O₂ modelado QM/MM y Cinética experimental

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de enzimas y su mecanismo

Medio de divulgación: Internet

Análisis de la interacción nitrolípidos-PPAR γ : un enfoque molecular preliminar (2012)

Resumen

M.V. VEROLI , A. MERLINO , E. Laura Coitiño

Evento: Nacional

Descripción: XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Piriápolis, Uruguay

Año del evento: 2012

Publicación arbitrada

Palabras clave: nitrolípidos interacción con PPAR γ

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Modelado computacional de interacciones receptor-agonista

Medio de divulgación: Internet

Modelado computacional y estudio experimental de propiedades del tiol de la albúmina sérica humana (2012)

Resumen

J. BONANATA, E. MÉNDEZ, B. ÁLVAREZ, E. Laura Coitiño

Evento: Nacional

Descripción: XIV Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias

Ciudad: Piriápolis, Uruguay

Año del evento: 2012

Publicación arbitrada

Palabras clave: Albúmina Sérica humana oxidación del tiol por H₂O₂ Caracterización QM/MM y FTIR

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Modelado computacional de enzimas y su mecanismo

Medio de divulgación: Internet

Assessing the Nature of the Protein H-bond Network on Substrates Transformation at the Active Site of EAL-B12 (2011)

Resumen

J. BONANATA, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: 5th Theoretical Biophysics International Symposium

Ciudad: Funchal, Madeira, Portugal

Año del evento: 2011

Anales/Proceedings: 5th Theoretical Biophysics International Symposium

Publicación arbitrada

Palabras clave: Ethanolamina Ammonio Liasa QM/MM ONIOM

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

<http://www.compbiochem.org/theobio2011/>

La prolina como capturador de radical hidroxilo (2011)

Resumen

SIGNORELLI, S., J. DÍAZ, J. MONZA, E. Laura Coitiño

Evento: Nacional

Descripción: 7mas Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2011

Publicación arbitrada

Palabras clave: Modelado computacional Radicales libres antioxidantes mecanismos moleculares de captura de OH estrés en plantas

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Ciencias de las Plantas, Botánica /

Medio de divulgación: Papel

Acercamiento a las percepciones de investigadores nacionales sobre temáticas de Cs Naturales a tratar y competencias científicas a incentivar en jóvenes al inicio del Bachillerato (2011)

Resumen

E. Laura Coitiño, M. GONZÁLEZ, T. FERNÁNDEZ

Evento: Nacional

Descripción: X Jornadas de Investigación de la Facultad de Ciencias Sociales
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2011
Anales/Proceedings: Facultad de Ciencias Sociales-X Jornadas de investigación. Derechos Humanos, seguridad y violencia.
Publicación arbitrada
Palabras clave: Competencias científicas
Áreas de conocimiento:
Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General /
Medio de divulgación: Papel

Caracterización de la nucleofilia y pKa de la cisteína peroxidática (Cys47) de la peroxirredoxina V humana (2011)

Resumen
STEPHANIE PORTILLO , G. FERRER-SUETA , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: 7mas Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2011
Publicación arbitrada
Palabras clave: Reactividad tioles enfoque teórico-experimental integradopKa y nucleofilia
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular /
Medio de divulgación: Papel

Estudio comparado de la interacción ligando-proteína entre complejos [Re(V)O₂L₂]+1 (L = diamina alifática) y albúmina sérica de origen bovino y humano (2011)

Resumen
J. BONANATA , A. MERLINO , M.F. CERDÁ , E. Laura Coitiño

Evento: Nacional
Descripción: ENAQUI, Segundo Encuentro Nacional de Ciencias Químicas
Ciudad: Montevideo
Año del evento: 2011
Publicación arbitrada
Palabras clave: Modelado por homología docking molecular ligando-proteína caracterización DFT de compuestos de Re(V)
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Compuestos de Re(V)
Medio de divulgación: Papel

Computational Modeling Encounters with Medicinal and Biological Chemistry: contributions to drug optimization and to a better understanding of human pathologies. (2011)

Resumen
E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: Winter Modelling 2011
Ciudad: Pisa, Italia
Año del evento: 2011
Anales/Proceedings: Winter Modelling
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Papel
<http://idea.sns.it/wintermodeling2011.php?lng=it&page=home>
Conferencia invitada, financiación con cargo a la partida de DT

Modulación por nitración de la reactividad y la capacidad de interacción de ácidos grasos insaturados (2011)

Resumen

M.V. VEROLI , STEPHANIE PORTILLO , A. TROSTCHANSKY , H. RUBBO , E. Laura Coitiño

Evento: Nacional

Descripción: 7mas Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular

Ciudad: Montevideo

Año del evento: 2011

Publicación arbitrada

Palabras clave: nitrolípidos Modelado DFT/PCM reactividad y reconocimiento molecular

Áreas de conocimiento:

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

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

Cysteine thiol reactivity, H-bond patterns, and Transition State features in forming sulfenic acid by nucleophilic attack on H₂O₂: how are they tuned by the environment? (2011)

Resumen

STEPHANIE PORTILLO , G. FERRER-SUETA , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: 1st Symposium Thiol metabolism and redox regulation of cellular functions

Ciudad: Punta Ballena, Maldonado

Año del evento: 2011

Anales/Proceedings: Thiol metabolism and redox regulation of cellular functions

Publicación arbitrada

Palabras clave: Modelado DFT/PCM efectos del entorno (DFT/PCM) Formación de ácido sulfénico oxidación tioles

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

Molecular docking studies and binding mode prediction of novel T. Cruzi triosephosphate isomerase inhibitors (2011)

Resumen

A. MERLINO , G. ALVAREZ , R. PEREZ-MONFORT , A. GOMEZ-PUYOU , M. GONZÁLEZ , H.

CERECETTO , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: XL Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular - SBBq

Ciudad: Foz de Iguazu, BRasil

Año del evento: 2011

Anales/Proceedings: XL Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Bioquímica e Biologia Molecular - SBBq

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

Financiación/Cooperación:

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

http://sbbq.iq.usp.br/v2/index.php?option=com_content&task=view&id=667&Itemid=131

Estructura y reconocimiento molecular para una nueva variante (L163R) de la proteína von Hippel-Landau (2011)

Resumen

C. MATHÓ , A. MERLINO , G. SANSÓ , P. PENNISI , E. Laura Coitiño

Evento: Nacional

Descripción: 7mas Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2011

Publicación arbitrada

Palabras clave: Modelado computacional enfermedad de von Hippel-Landau Complejos proteicos y mutaciones in silico

Áreas de conocimiento:

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

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Papel

Unravelling the mechanism of action of bioactive Pt/Pd-thiosemicarbazone complexes with the aid of conceptual DFT and Fukui indexes (2011)

Resumen

L. MININI , A. MERLINO , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: Quantum Bioinorganic Chemistry 3

Ciudad: Cesky Krumlov, Republica Checa

Año del evento: 2011

Anales/Proceedings: Proceedings of the Quantum Bioinorganic Chemistry 3

Publicación arbitrada

Palabras clave: DFT/PCM Pt/Pd bioactiva complexes Fukui functions anion radicals

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

www.qbic2011.cz

Fomentando la metacognición y el desarrollo de pensamiento autónomo y crítico desde ambientes de aprendizaje cooperativo/colaborativo en Físicoquímica Moderna (2010)

Resumen

E. Laura Coitiño , J. BONANATA , A. MERLINO , L. MININI , A. PITTINI , STEPHANIE PORTILLO

Evento: Regional

Descripción: IV Foro de Innovaciones en Educación Superior

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2010

Publicación arbitrada

Palabras clave: Mapas conceptuales Enseñanza Superior Innovadora Integración de TICs Rúbricas y

Transparencia al Evaluar

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Internet

<http://ivforoinnova.cse.edu.uy/publicacion/comunicaciones10.html>

Labor de investigación educativa, desarrollada en el encuadre de un proyecto de innovación de la enseñanza de grado (2009-2010) que obtuviera fondos por concurso a nivel de toda la UdelaR.

Fomento de las capacidades de investigación en cursos de grado: abordaje interdisciplinario de problemas en Ciencias de la Vida (2010)

Resumen

E. Laura Coitiño , M. GONZÁLEZ , V. LÓPEZ , STEPHANIE PORTILLO , A. SAADOUN

Evento: Regional

Descripción: IV Foro de Innovaciones en Educación Superior

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2010

Publicación arbitrada

Palabras clave: Formación multidisciplinar por problemas Investigación en Ciencias de la Vida

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Otros Tópicos Biológicos / Fisiología y Nutrición

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Orgánica / Química Teórica y Computacional

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Internet

<http://ivforoinnova.cse.edu.uy/publicacion/comunicaciones12.html>

Bridging Expert and Novice Knowledge through the Collaborative Construction of Concept Maps in a Higher Education Learning Environment (2010)

Completo

E. Laura Coitiño , M. MIGUEZ

Evento: Internacional
Descripción: 4th International Conference on Concept Mapping
Ciudad: Viña del Mar, Chile
Año del evento: 2010
Publicación arbitrada
Palabras clave: Mapas conceptuales educación superior conocimiento experto y novato
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Aprendizaje colaborativo,
aprendizaje profundo
Medio de divulgación: Papel
<http://cmc.ihmc.us/cmc2010papers/cmc2010-213-poster.pdf>

Formando Docentes en la evaluación de aprendizajes estudiantiles con el apoyo de matrices de valoración (2010)

Resumen
E. Laura Coitiño, A. CZERWONOGORA

Evento: Regional
Descripción: JORNADAS REGIONALES SOBRE LA FORMACIÓN EN DOCENCIA UNIVERSITARIA
Ciudad: Montevideo, Uruguay
Año del evento: 2010
Publicación arbitrada
Palabras clave: Enseñanza superior- evaluación formativa Matrices de valoración Formación de equipos académicos-docentes
Áreas de conocimiento:
Ciencias Sociales / Ciencias de la Educación / Educación General / Educación Universitaria - Evaluación
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Internet
<http://jornadasendocencia.blogspot.com/>

In silico characterization of the interaction of a series of [ReO₂L₂]⁺ Complexes with Serum Albumin (2010)

Resumen
J. BONANATA, A. MERLINO, M. F. CERDÁ, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: 1st International Conference on Bioinformatics SolBio 2010
Ciudad: Termas del Chillán, Chile
Año del evento: 2010
Publicación arbitrada
Palabras clave: Complejos de Re(V) Interacción con albúmina Docking y modelado DFT
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Quimioinformática/Bioinformática/Minería de Datos
Medio de divulgación: Otros
<http://cbsm.utralca.cl/soibio2010/>

Insights into the mechanism of binding of nitro fatty acids to mammalian COX-2 (2010)

Resumen
A. MERLINO, STEPHANIE PORTILLO, L. BONILLA, A. TROTSCHANSKY, H. RUBBO, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: 1st International Conference on Bioinformatics SolBio 2010
Ciudad: Termas del Chillán, Chile
Año del evento: 2010
Publicación arbitrada
Palabras clave: nitración ácido araquidónico Interacción COX-1 y COX-2 Molecular docking & DFT
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular /

Medio de divulgación: Otros

<http://cbsm.otalca.cl/soibio2010/>

Este trabajo constituye la primer presentación derivada de una cooperación iniciada en 2010 por E.L. Coitiño con el Dr. Homero Rubbo y su equipo en Facultad de Medicina centrada en la caracterización de la nitración de ácidos grasos y sus interacciones en el organismo.

Increasing Complexity Models for Describing the Generation of Substrate Radicals at the Active Site of Ethanolamine Ammonia Lyase/B12 (2010)

Resumen

E. Laura Coitiño, J. BONANATA, SIGNORELLI, S.

Evento: Internacional

Descripción: 7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA)

Ciudad: Oviedo, España

Año del evento: 2010

Publicación arbitrada

Palabras clave: etanolamina amonio-liasa PCM polarización proteína catálisis radicales

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

<http://www.espa2010.com/>

DFT and Data Mining Characterization of a Series of Pt(IV) Prospective Anticancer Agents and their Pt(II) Metabolites (2010)

Resumen

A. PITTINI, STEPHANIE PORTILLO, A. MERLINO, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: IX Girona Seminar Electron Density, Density Matrices, and Density Functional Theory

Ciudad: Girona, España

Año del evento: 2010

Publicación arbitrada

Palabras clave: anticancerígenos Pt(IV) descriptores DFT Clasificación HCA PCAdiseño racional de fármacos

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

<http://iqc.udg.edu/gs2010/>

Lipid membrane solubility and permeability of nitrogen dioxide (2009)

Resumen

SIGNORELLI, S., MÖLLER, M., E. Laura Coitiño, DENICOLA, A.

Evento: Internacional

Descripción: 16th Annual Meeting of SFRBM (Society of Free Radical Biology and Medicine)

Ciudad: San Francisco

Año del evento: 2009

Anales/Proceedings: FREE RADICAL BIOLOGY AND MEDICINE

Volumen: 47

Publicación arbitrada

Palabras clave: lipid membrane permeability NO₂ vs NO DFT-PCM modeling

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Fisiología Biológica -Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

<http://www.sfrbm.org/16AnnualMeeting.php>

Presentado por la Dra. Denicola en USA

Caracterización detallada a nivel molecular y electrónico del mecanismo de activación por acución del antitumoral Picoplatin (2009)

Resumen

L. COUTO, E. Laura Coitiño

Evento: Nacional

Descripción: 6tas Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular
Ciudad: Montevideo, Uruguay
Año del evento: 2009
Publicación arbitrada
Palabras clave: modelado DFT-PCM antitumorales de Pt activación por acuación
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química /
Fisicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos
Medio de divulgación: Papel
http://www.iibce.edu.uy/SBBM/sextas_jornadas.html
Poster -

Caracterización fisicoquímica de fármacos anti-cancerígenos de Pt(IV) y metabolitos principales. (2009)

Resumen
A. PITTINI , E. Laura Coitiño

Evento: Nacional
Descripción: 6tas Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular
Ciudad: Montevideo, Uruguay
Año del evento: 2009
Publicación arbitrada
Palabras clave: anticancerígenos Pt(IV) Validación metodológica
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química /
Fisicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos
Medio de divulgación: Papel
http://www.iibce.edu.uy/SBBM/sextas_jornadas.html

Lipid membrane solubility and permeability of nitrogen dioxide (2009)

Resumen
SIGNORELLI, S. , MÖLLER, M. , E. Laura Coitiño , DENICOLA, A.

Evento: Internacional
Descripción: Free Radicals and Antioxidants in Chile 2009 VI Meeting of the SFRBM-South American Group
Ciudad: Santiago de Chile, Chile
Año del evento: 2009
Publicación arbitrada
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química /
Fisicoquímica Biológica, Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos
Medio de divulgación: Papel
www.sfrbm-chile2009.cl
Presentado por el Bach. Signorelli en Chile

Singularidades del Compuesto Antitumoral Oxaliplatino Evidenciadas por Comparación de Potenciales Electroestáticos 3D. (2009)

Resumen
A. MERLINO , R. MARÍN , PABLO D. DANS , E. DAZA , E. Laura Coitiño

Evento: Nacional
Descripción: 6tas Jornadas de la Sociedad de Bioquímica y Biología Molecular
Ciudad: Montevideo, Uruguay
Año del evento: 2009
Publicación arbitrada
Palabras clave: Anticancerígenos Pt/PD comparación 3D Potencial Molecular Electroestático
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Fisicoquímica Biológica -Química Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Internet
http://www.iibce.edu.uy/SBBM/sextas_jornadas.html

From Mono to Bifunctional Binding of Cisplatin to DNA: Characterizing the Sequence-Dependent DNA Structural Changes with QM/MM Methods (2008)

Resumen
PABLO D. DANS , E. Laura Coitiño , ALEJANDRO CRESPO , D. ESTRÍN

Evento: Internacional

Descripción: Conference on modeling and computation of structure and dynamics of condensed phase systems - CPMD08

Ciudad: Trieste, Italy

Año del evento: 2008

Publicación arbitrada

Palabras clave: DNA-Cisplatin adducts QM/MM modeling Molecular dynamics

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Biofísica,

Bioinformática

Medio de divulgación: Papel

http://cdsagenda5.ictp.trieste.it/full_display.php?ida=a07209

Characterizing Δ -[Ru(bpy)₂dppz]₂⁺ DNA probe intercalative behaviour at GG, GC, and CG steps (2008)

Resumen

L. DARRÉ, M. MACHADO, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: International Conference on Drug Design and Discovery for Developing Countries

Ciudad: ICS-UNIDO, Trieste, Italia

Año del evento: 2008

Publicación arbitrada

Palabras clave: DNA interactions Ru molecular switches DNA damage sensors Molecular dynamics

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

Characterizing the Influence of Local and Global Effects on the Interaction of B-DNA with Pt(II) and Ru(II) Complexes Relevant in Biomedical Applications (2008)

Resumen

E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: XXXIV Conference of Theoretical Chemists of Latin Expression

Ciudad: Cetraro, Italia

Año del evento: 2008

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

<http://chimica.unical.it/chitel08/>

Conferencia plenaria invitada

Tunneling and kinetic isotopic effects at the first step in the reaction catalyzed by ethanolamine ammonia lyase and B12 (2007)

Resumen

SIGNORELLI, S., N. PUIG, M. MACHADO, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 07)

Ciudad: La Habana, Cuba

Año del evento: 2007

Publicación arbitrada

Palabras clave: Protein environment effects EAL kinetics DFT & PCM modeling

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

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

computacional

Medio de divulgación: CD-Rom

<http://karin.fq.uh.cu/quitel33/>

Comunicación oral seleccionada

Aspectos mecanísticos de la interconversión directa e inversa del Cisplatino/Transplatino (2007)

Resumen

PABLO D. DANS , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 07)

Ciudad: La Habana, Cuba

Año del evento: 2007

Publicación arbitrada

Palabras clave: DFT - PCMCisplatin isomerization Water assistance

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: CD-Rom

<http://karin.fq.uh.cu/quitel33/>

Gaining insight on how local and global environment tunes intrinsic reactivity of purines towards oxidative processes in DNA (2007)

Resumen

E. Laura Coitiño , PABLO D. DANS , A. CASTRO

Evento: Internacional

Descripción: 6th International Conference of Biological Physics, 5th Southern Cone Biophysics Congress

Ciudad: Montevideo. 27-31 agosto 2007.

Año del evento: 2007

Publicación arbitrada

Palabras clave: DNA reactivity HF & PCMONIOM QM/MM

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química /

Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Water dynamics in the hydration layer around central base-pairs in DNA sequences relevant to its damage and treatment (2007)

Resumen

PABLO D. DANS , G. MOURGLIA , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: 6th International Conference of Biological Physics, 5th Southern Cone Biophysics Congress

Ciudad: Montevideo. 27-31 agosto 2007.

Año del evento: 2007

Publicación arbitrada

Palabras clave: Molecular dynamics Hydration structure & dynamics DNA hydration

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química /

Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

Sequence Dependent Δ -[Ru(bpy)₂dppz]₂⁺-DNA Complex Dynamical Behavior (2007)

Resumen

M. MACHADO , L. DARRÉ , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: 6th International Conference of Biological Physics, 5th Southern Cone Biophysics Congress

Ciudad: Montevideo. 27-31 agosto 2007.

Año del evento: 2007

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Biofísica,
Bioinformática
Medio de divulgación: Papel

Estudio de la hidratación de dos purinas centrales y su efecto en la reactividad de hexámeros de B-ADN simulados en condiciones fisiológicas (2006)

Resumen
PABLO D. DANS , E. Laura Coitiño

Evento: Nacional
Descripción: V Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular -SBBM/SUB
Ciudad: Montevideo, Uruguay
Año del evento: 2006
Publicación arbitrada
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Biofísica,
Bioinformática
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos
Medio de divulgación: Papel

Análisis estructural comparativo del daño oxidativo secuencial del ADN GG -> 8oxoGG -> sitio AP simulado en condiciones fisiológicas (2006)

Resumen
G. MOURGLIA , PABLO D. DANS , E. Laura Coitiño

Evento: Nacional
Descripción: V Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular -SBBM/SUB
Ciudad: Montevideo, Uruguay
Año del evento: 2006
Publicación arbitrada
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos
Medio de divulgación: Papel

Modelado de la interacción del complejo [Ru(bpy)2dppz]+2 en un dodecámero de ADN: geometrías de intercalación y efectos sobre la estructura macromolecular. (2006)

Resumen
L. DARRÉ , M. MACHADO , E. Laura Coitiño

Evento: Nacional
Descripción: V Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular -SBBM/SUB
Ciudad: Montevideo, Uruguay
Año del evento: 2006
Publicación arbitrada
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos
Medio de divulgación: Papel

Modern Physical Chemistry of Complex Systems: Establishing protocols for coping with problems of biological and biomedical interest. (2006)

Resumen
E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: Eight Giambiagi Winter School Part B and Workshop Research trends in clusters, biomolecules and materials.
Ciudad: Buenos Aires, Argentina
Año del evento: 2006
Publicación arbitrada
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos
Medio de divulgación: Papel
Comunicación invitada

A MD and QM/MM Characterization of Cisplatin-Guanine Monoadducts Embedded in B-DNA Hexamers under Physiological Conditions (2006)

Resumen

PABLO D. DANS , E. Laura Coitiño , ALEJANDRO CRESPO , D. ESTRÍN

Evento: Internacional

Descripción: Eight Giambiagi Winter School Part B and Workshop Research trends in clusters, biomolecules and materials.

Ciudad: Buenos Aires, Argentina

Año del evento: 2006

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Why do CpG and GpC steps display different reactivity patterns in DNA? (2006)

Resumen

G. MOURGLIA , PABLO D. DANS , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: Eight Giambiagi Winter School Part B and Workshop Research trends in clusters, biomolecules and materials.

Ciudad: Buenos Aires, Argentina

Año del evento: 2006

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Characterizing the Photophysical Behavior in Water of a Series of [Ru(II)L2(dpp)]²⁺ Molecular Light Switches by PCM-TDDFT (2006)

Resumen

E. Laura Coitiño , L. DARRÉ

Evento: Internacional

Descripción: Eight Giambiagi Winter School Part B and Workshop Research trends in clusters, biomolecules and materials.

Ciudad: Buenos Aires, Argentina

Año del evento: 2006

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

One enzyme, one step in the catalyzed reaction mechanism and a continuum model to represent different local mediums at play (2006)

Resumen

M. MACHADO , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: Eight Giambiagi Winter School Part B and Workshop Research trends in clusters, biomolecules and materials.

Ciudad: Buenos Aires, Argentina

Año del evento: 2006

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos
Medio de divulgación: Papel

QSAR and Data-mining on Theoretical Predictors for the Anticancer Profile of a Series of 35 Pt/Pd Square-Planar Complexes (2006)

Resumen
PABLO D. DANS , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: Conference on Drug Development for the Third World
Ciudad: ICTP, Trieste, Italia
Año del evento: 2006
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Biofísica, Bioinformática
Medio de divulgación: Papel

Characterizing molecular targets for early inhibition of in vivo Maillard reactions (2006)

Resumen
V. LEONE , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: Conference on Drug Development for the Third World
Ciudad: ICTP, Trieste, Italia
Año del evento: 2006
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Biofísica, Bioinformática
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos
Medio de divulgación: Papel
http://cdsagenda5.ictp.trieste.it/pdf_display.php?ida=a05207

Tuning [Ru(II)(dppz)L2]2+ Molecular Light-Switches Electron Structure and Response by Environment: Computer-Aided Design of Sensors for Early Diagnosis of Genetic Diseases. (2006)

Resumen
E. Laura Coitiño , L. DARRÉ

Evento: Internacional
Descripción: Conference on Drug Development for the Third World
Ciudad: ICTP, Trieste, Italia
Año del evento: 2006
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos
Medio de divulgación: Papel
cdsagenda5.ictp.trieste.it/pdf_display.php?ida=a05207

Modelling the medium's effect over a step in the reaction catalysed by the enzyme Ethanolamine ammonia lyase (2005)

Resumen
M. MACHADO , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional
Descripción: XXXIV Reunião Anual da SBBq - 2 a 5 de julho de 2005
Ciudad: Aguas de Lindoia, BRasil
Año del evento: 2005
Publicación arbitrada
Palabras clave: Ethanolamine Ammonia Lyase DFT modeling Protein environment effects 1,2-NH3 migration mechanism

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

<http://sbbq.iq.usp.br/arquivos/2005/cdlivro/index.htm>

Trabajo premiado con una beca para cubrir la participación del Bach. M. Machado

Desafíos y demandas para el sector bioinformático: de la estructura de biomoléculas a la medicina molecular (2005)

Resumen

E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: Taller Perspectivas para el Desarrollo de la Bioinformática en el Uruguay

Ciudad: LATU, Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2005

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Biofísica, Bioinformática

Medio de divulgación: Papel

Efectos del entorno sobre la barrera y reorganización electrónica en la migración 1,2-NH₃ del sustrato del sistema etanolamina-amonioliasa/B12. (2004)

Resumen

M. MACHADO, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: 3er Jornadas de Bioquímica y Biología Molecular

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2004

Publicación arbitrada

Palabras clave: EAL Efectos del medio proteico Enzimología Computacional

Áreas de conocimiento:

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

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

Medio de divulgación: Papel

Trabajo seleccionado como el mejor de su sección.

Caracterización del mecanismo de glicación entre CH₃NH₂ y glucosa y la acción catalítica del agua (2004)

Resumen

V. LEONE, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: QUITEL 2004 XXX Congresso Internacional de Químicos Teóricos de Espresión Latina

Año del evento: 2004

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Biofísica, Bioinformática

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Análisis Estadístico con Descriptores Cuánticos DFT sobre una población de 21 Compuestos Análogos del Cisplatino. (2004)

Resumen

PABLO D. DANS, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: QUITEL 2004 XXX Congresso Internacional de Químicos Teóricos de Espresión Latina

Ciudad: Porto, Portugal

Año del evento: 2004

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física Atómica, Molecular y Química / Biofísica, Bioinformática

Medio de divulgación: Papel

Estudio Teórico Comparativo del Mecanismo de la Reacción de Acuación de 7 Análogos Cuadrado-Planos de Pt(II) y Pd(II) del Cisplatino (2004)

Resumen

PABLO D. DANS, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: QUITEL 2004 XXX Congresso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: Porto, Portugal

Año del evento: 2004

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Comunicación oral seleccionada

Análisis de la reactividad intrínseca de las nucleobases en secuencias de ADN relevantes frente a la acción de la Mitomicina C mediante cálculos ab initio. (2002)

Resumen

E. Laura Coitiño, A. CASTRO

Evento: Internacional

Descripción: XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Glucosilación no enzimática de proteínas: mecanismo de las etapas tempranas del proceso y la inhibición de la formación de AGEs por etanol. (2002)

Resumen

E. Laura Coitiño, V. LEONE

Evento: Internacional

Descripción: XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Caracterización de la estructura electrónica de dominios HMG relevantes en el reconocimiento molecular de lesiones del ADN causadas por Cisplatino y análogos. (2002)

Resumen

A. SANABRIA, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Modificaciones de la Estructura Electrónica de ADN Duplex tras la formación de aductos con Cisplatino u Oxaliplatino. (2002)

Resumen

K. CAL, E. Laura Coitiño, PABLO D. DANS, A. CASTRO

Evento: Internacional

Descripción: XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Análisis comparativo DFT de la estructura y reactividad de 11 compuestos análogos del Cisplatino con potencial acción antineoplásica. (2002)

Resumen

PABLO D. DANS, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Caracterización DFT de los procesos de hidrólisis del análogo del Cisplatino cis-bipiridina-dicloro-Pt(II) y sus aductos 1:1 con Guanina y Adenina. (2002)

Resumen

PABLO D. DANS, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: XXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

Ciudad: Montevideo, Uruguay

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Comunicación oral seleccionada

Análisis de la Reactividad intrínseca de las nucleobases en secuencias de ADN relevantes frente a la acción de agentes oxidantes (2002)

Resumen

A. CASTRO, E. Laura Coitiño

Evento: Nacional

Descripción: X Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias (SUB)

Ciudad: Balneario Solís, Uruguay

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

How Purine Reactivity is Affected by Local Environments in DNA Sequences Relevant to Cisplatin and Oxidative Damage. (2002)

Resumen

A. CASTRO , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: Sanibel Symposium, 2002

Ciudad: St. Augustine, Florida, USA

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Comparative Analysis of the hydrolysis of Cisplatin [Pt(II)(NH₃)₂Cl₂] and its Pd(II) Square-planar Analogues. (2002)

Resumen

PABLO D. DANS , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: Sanibel Symposium, 2002

Ciudad: St. Augustine, Florida, USA

Año del evento: 2002

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Structural Consequences of the Pt-Pd Substitution in Anticancer Drugs. An Ab Initio HF and DFT Study of DNA Lesion Site Models (2000)

Resumen

PABLO D. DANS , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: Xth International Congress of Quantum Chemistry

Ciudad: Menton, Francia

Año del evento: 2000

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Thermochemistry, Solvation, and Dynamics. (2000)

Resumen expandido

DONALD G. TRUHLAR , YAO-YUAN CHUANG , E. Laura Coitiño , PATTON L. FAST , JOSÉ C. CORCHADO , CHRISTOPHER J. CRAMER

Evento: Nacional

Descripción: ACS National Symposium - Fall 1999 - Symposium CHEMISTRY OF REACTIVE INTERMEDIATES AND MODELING IN HYDROCARBON CONVERSION

Ciudad: New Orleans

Año del evento: 2000

Anales/Proceedings: American Chemical Society Division of Fuel Chemistry Preprints of Symposia

Volumen: 44

Fascículo: 3

Página inicial: 452

Página final: 458

Publicación arbitrada

Editorial: ACS

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Un recorrido interesante en Química Biológica: del mundo cuántico al universo de los problemas de interés bioquímico (2000)

Resumen

E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: XXVI Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: Caxambú, MG, Brasil

Año del evento: 2000

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Conferencia seleccionada

Análisis estructural a nivel HF y DFT de los aductos principales formados por el ADN con fármacos de la familia del Cisplatino (2000)

Resumen

PABLO D. DANS , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: XXVI Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

Ciudad: Caxambú, MG, Brasil

Año del evento: 2000

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Exploring the Generation of Radical and Distonic Radical Cations of Ketenes by Ionization of 2-trans-Alkenals-Water Complexes. (2000)

Resumen

E. Laura Coitiño , L. LUCCHINI , S. E. VÁZQUEZ

Evento: Internacional

Descripción: Xth International Congress of Quantum Chemistry

Ciudad: Menton, Francia

Año del evento: 2000

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Modeling the Mechanism of Action of Antitumoral Drugs. A Quantum Mechanics Study of the DNA-cPd Interaction. (1999)

Resumen

E. Laura Coitiño , PABLO D. DANS

Evento: Internacional

Descripción: Sanibel Symposium, 1999

Año del evento: 1999

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Modelado del mecanismo de reacciones de metalación en fase gaseosa y condensada con métodos Ab initio, DFT y el modelo PCM/IEF (1998)

Resumen

E. Laura Coitiño , F. FLORIS , JACOPO TOMASI

Evento: Internacional

Descripción: XXIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

Ciudad: Puebla, México

Año del evento: 1998

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

Comunicación oral seleccionada

Effetti del solvente sulla caratterizzazione di stati di transizione e cammini di reazione: trasposizione di claisen (1998)

Resumen

C. CAPELLI , E. Laura Coitiño , JACOPO TOMASI

Evento: Internacional

Descripción: XXIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

Ciudad: Puebla, México

Año del evento: 1998

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos

Medio de divulgación: Papel

Contaminacion de spin: efectos sobre la estructura del estado de transicion y la barrera del canal principal de combustion del Metanol (1998)

Resumen

L. CARRASCO , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: XXIV Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina.

Ciudad: Puebla, México

Año del evento: 1998

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Química Atmosférica

Medio de divulgación: Papel

New Methods for Direct Dynamics Calculations of Reaction Rates of Combustion Reactions. (1998)

Resumen

DONALD G. TRUHLAR , JOSÉ C. CORCHADO , Y.-Y. CHUANG , PATTON L. FAST , J. VILLA , E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: Symposium on Chemistry of Combustion Processes National Meeting of the American Chemical Society

Ciudad: Dallas, Texas, USA

Año del evento: 1998

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Química Atmosférica

Medio de divulgación: Papel

Modeling Kinetics in Atmospheric Chemistry using Variational Transition State Theory: A Successful Story (1998)

Resumen

E. Laura Coitiño , O. ROBERTO-NETO , , DONALD G. TRUHLAR

Evento: Internacional

Descripción: IAI and NASA Workshop: Understanding Ozone and UV-B Radiation. Past Accomplishments and Future Opportunities

Ciudad: Buenos Aires, Argentina

Año del evento: 1998

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Química Atmosférica

Medio de divulgación: Papel

A Systematic Analysis of Bond Energies Calculated by the IMOMO Method (1998)

Resumen

E. Laura Coitiño, DONALD G. TRUHLAR

Evento: Internacional

Descripción: 9th International Congress of Quantum Chemistry

Ciudad: Atlanta, USA

Año del evento: 1998

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Dual Level Direct Dynamics Calculations of Rate Processes (1997)

Resumen

DONALD G. TRUHLAR, Y.-Y. CHUANG, J.C. CORCHADO, PATTON FAST, E. Laura Coitiño

Evento: Internacional

Descripción: 214th National American Chemical Society Meeting.

Ciudad: Las Vegas, Nevada, USA

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, Teoría Variacional del Estado de Transición

Medio de divulgación: Papel

Overcoming the Spin Contamination Effect at Open-Shell Transition states (1997)

Resumen

E. Laura Coitiño, Y.-Y. CHUANG, DONALD G. TRUHLAR

Evento: Internacional

Descripción: 9th International Congress of Quantum Chemistry

Ciudad: Atlanta, USA

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Substituent Effects in a Series of Neutral and Cation Radical Complexes of Vinyl Alcohol with Proton Acceptors: A Quantum Molecular Similarity Measures Analysis using HF, MP2 and DFT Electron Densities. (1997)

Resumen

L. LUCCHINI, E. Laura Coitiño, M. FORES, M. SOLÁ, M. DURÁN

Evento: Internacional

Descripción: 9th International Congress of Quantum Chemistry

Ciudad: Atlanta, USA

Año del evento: 1997

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

Cinética (VTST) de Procesos de Interés Atmosférico: Abstracción de H en Hidrocarburos Alifáticos por Reacción con Radicales OH. (1996)

Resumen

E. Laura Coitiño, DONALD G. TRUHLAR

Evento: Internacional

Descripción: XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: Cáceres, España.

Año del evento: 1996

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Química Atmosférica

Medio de divulgación: Papel

Cationes Radicales Derivados de Complejos CH₂=CHOH...OHR y CH₂=CHOH...O=CHR: Un Estudio con Métodos Ab Initio y Funcionales de la Densidad B3LYP (1996)

Resumen

E. Laura Coitiño, L. LUCCHINI

Evento: Internacional

Descripción: XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: Cáceres, España.

Año del evento: 1996

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

Caracterización de la Hiperficie de Energía Potencial (PES) para los sistemas H₂CO...NH₃ Neutro y Cation Radical. (1996)

Resumen

E. Laura Coitiño, M. L. CUBAS, OSCAR N. VENTURA

Evento: Internacional

Descripción: XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: Cáceres, España.

Año del evento: 1996

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

Improved Methods for Direct Dynamics Calculations of Organic Reactions (1996)

Resumen

DONALD G. TRUHLAR, Y.-Y. CHUANG, E. Laura Coitiño, W.-P. HU, S. CLAYTON, R. STECKLER

Evento: Internacional

Descripción: Symposium on Organic Reactions by Ab initio Methods, 212th National American Chemical Society Meeting.

Ciudad: Orlando, FL, USA

Año del evento: 1996

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

Correlated Ab Initio Calculations on the Transition State Structure, Barrier Height and Vibrational Frequencies for the Reaction C₂H₆ + OH -> C₂H₅ + H₂O (1996)

Resumen

E. Laura Coitiño, DONALD G. TRUHLAR

Evento: Internacional
Descripción: 8ht Annual Conference on New Methods in Electronic Structure Calculations
Ciudad: Minneapolis, USA
Año del evento: 1996
Publicación arbitrada
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Papel

Dual Level Reaction-Path Dynamic Calculations on the C₂H₆ + OH -> C₂H₅ + H₂O Reaction (1996)

Resumen
E. Laura Coitiño, DONALD G. TRUHLAR

Evento: Internacional
Descripción: 2nd Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics
Ciudad: New Orleans, USA
Año del evento: 1996
Publicación arbitrada
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Química Atmosférica
Medio de divulgación: Papel

Degenerate Lithium-Hydrogen Exchange Reactions: An Alternative Mechanism for Metalation of CH₄ (1996)

Resumen
E. Laura Coitiño, E. CIUFFARIN, FRANCA M. FLORIS, JACOPO TOMASI

Evento: Internacional
Descripción: 2nd Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics
Ciudad: New Orleans, USA
Año del evento: 1996
Publicación arbitrada
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Papel

Rol Activo del Solvente en la hidratación del glioxal en solución acida acuosa. (1995)

Resumen
E. Laura Coitiño, JACOPO TOMASI, OSCAR N. VENTURA

Evento: Internacional
Descripción: XXII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. QUITEL XXII.
Ciudad: Pucón, Chile
Año del evento: 1995
Publicación arbitrada
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Papel

Mechanism of the Acid-Catalyzed Hydration of Glyoxal in Aqueous Solution: An Ab Initio Study (1994)

Resumen
E. Laura Coitiño, JACOPO TOMASI, OSCAR N. VENTURA

Evento: Internacional
Descripción: 8th International Congress of Quantum Chemistry
Ciudad: Praga, República Checa
Año del evento: 1994
Publicación arbitrada
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Papel

Transition States for Hydrogen Abstraction in [H₂CO-H₂O]⁺. Complexes. How reliable is UMP2? (1994)

Resumen

E. Laura Coitiño, M. SOLÁ, M. DURÁN, OSCAR N. VENTURA

Evento: Internacional

Descripción: 8th International Congress of Quantum Chemistry

Ciudad: Praga, República Checa

Año del evento: 1994

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

Theoretical Study of the Internal Rotation in Neutral and Protonated Glyoxal: from Gas Phase to Aqueous Solution. (1994)

Resumen

E. Laura Coitiño, JACOPO TOMASI

Evento: Internacional

Descripción: 1st European Conference on Computational Chemistry.

Ciudad: Nancy, Francia.

Año del evento: 1994

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

Medio de divulgación: Papel

Estensioni del modello del Continuo Polarizzabile (PCM): Algoritmi alternativi per la determinazione delle cariche superficiali apparenti (1994)

Resumen

E. Laura Coitiño, JACOPO TOMASI, ROBERTO CAMMI

Evento: Nacional

Descripción: 2do Convegno Nazionale di Informatica Chimica

Ciudad: Bologna, Italia.

Año del evento: 1994

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, desarrollo PCM

Medio de divulgación: Papel

Solvente: Programmi per lo studio dei processi chimici in soluzione con il metodo degli Hamiltoniani efficaci con distribuzione continua del solvente (EHCD). (1994)

Resumen

R. BONACCORSI, ROBERTO CAMMI, E. Laura Coitiño, M. COSSI, FRANCA M. FLORIS, B. MENNUCCI, M. PERSICO, A. TANI, JACOPO TOMASI

Evento: Nacional

Descripción: 2do Convegno Nazionale di Informatica Chimica

Ciudad: Bologna, Italia.

Año del evento: 1994

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, desarrollo PCM

Medio de divulgación: Papel

Ab Initio Study of the Structure of Radical Cations derived from H-Bonded Complexes: A Comparison between [H₂CO-H₂O]⁺. and [H₂CO- HF]⁺. (1994)

Resumen

E. Laura Coitiño, ALBERTO PEREIRA, OSCAR N. VENTURA

Evento: Internacional
Descripción: 1st European Conference on Computational Chemistry.
Ciudad: Nancy, Francia.
Año del evento: 1994
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Papel

Importance of Water in Aldol Condensation Reactions of Acetaldehyde (1993)

Resumen
E. Laura Coitiño, JACOPO TOMASI, OSCAR N. VENTURA

Evento: Internacional
Descripción: Faraday Symposium N°29: Potential-energy Surfaces and Organic Reaction Paths
Ciudad: Oxford, Gran Bretaña
Año del evento: 1993
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, mecanismos de aldehídos
Medio de divulgación: Papel

Analisi della influenza del solvente in reazioni coinvolgenti il gruppo aldeidico usando metodi teorici (1993)

Resumen
E. Laura Coitiño, JACOPO TOMASI

Evento: Nacional
Descripción: Seminario Nazionale di Chimica Fisica 1993.
Ciudad: Torino, Italia
Año del evento: 1993
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, mecanismos de aldehídos
Medio de divulgación: Papel
Conferencia seleccionada

Evaluación de las cargas aparentes de polarización del solvente en modelos de cavidad: una nueva formulación (1993)

Resumen
E. Laura Coitiño, JACOPO TOMASI, ROBERTO CAMMI

Evento: Internacional
Descripción: XXI CHITEL- Congres des Chimistes Theoriciens d'Expression Latine
Ciudad: Grenoble, Francia
Año del evento: 1993
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, mecanismos de aldehídos
Medio de divulgación: Papel

Estudio ab initio del mecanismo de la hidratación ácida del glicoxal en disolución acuosa. (1993)

Resumen
E. Laura Coitiño, JACOPO TOMASI, OSCAR N. VENTURA

Evento: Internacional
Descripción: XXI CHITEL- Congres des Chimistes Theoriciens d'Expression Latine
Ciudad: Grenoble, Francia
Año del evento: 1993
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, mecanismos de aldehídos
Medio de divulgación: Papel

Application of Microscopic (discrete) and Macroscopic (continuum) Models to the Study of Hydration Reaction of Glyoxals in Aqueous Solution. (1993)

Resumen

E. Laura Coitiño, JACOPO TOMASI, OSCAR N. VENTURA

Evento: Internacional

Descripción: Xth International Workshop Horizons in Hydrogen Bond Research

Ciudad: Autrans, Francia

Año del evento: 1993

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, mecanismos de aldehídos

Medio de divulgación: Papel

In Search of a Hydrogen-Bonded Distonic Radical Cation: the Formaldehyde-Water Complex (1993)

Resumen

E. Laura Coitiño, ALBERTO PEREIRA, OSCAR N. VENTURA

Evento: Internacional

Descripción: 1st Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics.

Ciudad: Girona, España

Año del evento: 1993

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, cationes radicales

Medio de divulgación: Papel

A Comparison of Different Methods for the Calculation of Surface Cavity Charges in the Ab Initio Continuum Model of the Solvent. (1993)

Resumen

E. Laura Coitiño, JACOPO TOMASI, ROBERTO CAMMI

Evento: Internacional

Descripción: 1st Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics.

Ciudad: Girona, España

Año del evento: 1993

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, desarrollo PCM

Medio de divulgación: Papel

Estudio ab initio de la reacción de hidratación de 2-oxoaldehídos. (1992)

Resumen

E. Laura Coitiño, OSCAR N. VENTURA, JACOPO TOMASI

Evento: Internacional

Descripción: XX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. XX QUITEL

Ciudad: Mérida, Venezuela

Año del evento: 1992

Publicación arbitrada

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, mecanismos de aldehídos

Medio de divulgación: Papel

Cálculo Ab Initio de cationes radicales derivados de complejos de enlace de hidrógeno: comparación de los dímeros CH₂O-HF y CH₂O-H₂O. (1992)

Resumen

ALBERTO PEREIRA, E. Laura Coitiño, OSCAR N. VENTURA

Evento: Internacional
Descripción: XX Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina. XX QUITEL
Ciudad: Mérida, Venezuela
Año del evento: 1992
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, cationes radicales
Medio de divulgación: Papel

Static effects of the solvent on reactions involving transformations of aldehyde groups: hydration of glyoxals. (1992)

Resumen
E. Laura Coitiño, JACOPO TOMASI, OSCAR N. VENTURA

Evento: Internacional
Descripción: European Research Conference
Ciudad: San feliu de Guixols, España
Año del evento: 1992
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, mecanismos de aldehídos
Medio de divulgación: Papel

Estructura y reactividad de radicales formados en espectroscopía REMPI de complejos formaldehído-agua (1990)

Resumen
E. Laura Coitiño, OSCAR N. VENTURA, RAMÓN SERRA, AGUSTÍ LLEDÓS, JOAN BERTRÁN

Evento: Internacional
Descripción: XIX Congreso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Espressione Latina.
Ciudad: Roma, Italia
Año del evento: 1990
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, cationes radicales
Medio de divulgación: Papel

Precisión de métodos semiempíricos en la determinación de la estructura de complejos de enlace de hidrógeno entre agua y amoníaco. (1990)

Resumen
E. Laura Coitiño, OSCAR N. VENTURA, RAMÓN M. SOSA

Evento: Internacional
Descripción: XIX Congreso Internazionale dei Chimici Teorici dei Paesi di Espressione Latina.
Ciudad: Roma, Italia
Año del evento: 1990
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, complejos enlace de hidrógeno
Medio de divulgación: Papel

Estudio Semiempírico del Efecto del Agua Sobre las Reacciones de Hidratación y Enolización del Acetaldehído (1989)

Resumen
E. Laura Coitiño, OSCAR N. VENTURA

Evento: Internacional
Descripción: 5o Simposio Brasileiro de Química Teórica.
Ciudad: Caxambú, Brasil
Año del evento: 1989
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, mecanismos aldehídos
Medio de divulgación: Papel

Cálculos MM2 y MNDO-PM3 en derivados glutatiónicos del metilglioxal (1989)

Resumen

M. L. CUBAS , E. Laura Coitiño , OSCAR N. VENTURA

Evento: Internacional

Descripción: 5o Simposio Brasileiro de Química Teórica.

Ciudad: Caxambú, Brasil

Año del evento: 1989

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, aductos metilglioxal-glutatión

Medio de divulgación: Papel

Test de Métodos Semiempíricos en Cálculos de Complejos de Enlace de Hidrógeno: dímeros de agua y amoníaco. (1989)

Resumen

E. Laura Coitiño , OSCAR N. VENTURA , RAMÓN M. SOSA

Evento: Internacional

Descripción: 5o Simposio Brasileiro de Química Teórica.

Ciudad: Caxambú, Brasil

Año del evento: 1989

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional, complejos enlace de hidrógeno

Medio de divulgación: Papel

Estudio Teórico de Complejos de Enlace de Hidrógeno Usando Métodos Semiempíricos. (1989)

Resumen

E. Laura Coitiño , KENNETH IRVING , JOSÉ RAMA , OSCAR N. VENTURA

Evento: Internacional

Descripción: XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: La Plata, Argentina

Año del evento: 1989

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Comput., complejos enlace de hidróg., test semiempíricos

Medio de divulgación: Papel

Estudio Comparativo de Cálculos AM1, MNDO/M y Ab Initio en la Reacción de Hidratación del Formaldehído. (1989)

Resumen

OSCAR N. VENTURA , E. Laura Coitiño , AGUSTÍ LLEDÓS , JOAN BERTRÁN

Evento: Internacional

Descripción: XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina

Ciudad: La Plata, Argentina

Año del evento: 1989

Publicación arbitrada

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Comput., reacción aldehídos., test semiempíricos

Medio de divulgación: Papel

Comparación de Resultados Semiempíricos y Post-Hartree-Fock (Corregidos por BSSE) en el Estudio de la Reacción de Adición Directa de Agua a Formaldehído. (1989)

Resumen

KENNETH IRVING , E. Laura Coitiño , A. IGLESIAS , OSCAR N. VENTURA , AGUSTÍ LLEDÓS

Evento: Internacional
Descripción: XVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Ciudad: La Plata, Argentina
Año del evento: 1989
Publicación arbitrada
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Comput., comparación metodológica
Medio de divulgación: Papel

Producción técnica

PRODUCTOS

POLYRATE 2015: Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics (2015)

Software, Otra
E. Laura Coitiño
Programa para cálculo de cinética de procesos químicos por dinámica directa semiclásica con efecto túnel
País: Estados Unidos
Disponibilidad: Restricta
Producto con aplicación productiva o social: Modelado de procesos para la industria
Institución financiadora: Universidad de Minnesota, Minneapolis, USA
Palabras clave: Cinética Química Dinámica directa Efecto túnel
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional
Medio de divulgación: Internet
<http://comp.chem.umn.edu/polyrate/>
February 1, 2015 POLYRATE 2015: Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics Jingjing Zheng, Shuxia Zhang, Benjamin J. Lynch, José C. Corchado, Yao-Yuan Chuang, Patton L. Fast, Wei-Ping Hu, Yi-Ping Liu, Gillian C. Lynch, Kiet A. Nguyen, Charles F. Jackels, Antonio Fernandez Ramos, Benjamin A. Ellingson, Vasilios S. Melissas, Jordi Villà, Ivan Rossi, Elena. L. Coitiño, Jingzhi Pu, Titus V. Albu Department of Chemistry and Supercomputing Institute University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota 55455 Artur Ratkiewicz Institute of Chemistry, University of Białystok, Poland Rozeanne Steckler Northwest Alliance for Computational Science & Engineering Oregon State University, Corvallis, Oregon 97331 Bruce C. Garrett Environmental Molecular Sciences Laboratory Pacific Northwest Laboratory Richland, Washington 99352 Alan D. Isaacson Department of Chemistry and Biochemistry Miami University Oxford, Ohio 45056 and Donald G. Truhlar Department of Chemistry and Supercomputing Institute University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota 55455 POLYRATE status: Most recent version: 2015 Date of most recent version: January 28, 2015 Date of most recent manual update: January 28, 2015

GAUSSRATE 2015 (2015)

Software, Otra
E. Laura Coitiño

País: Estados Unidos
Disponibilidad: Restricta
Producto con aplicación productiva o social
Palabras clave: Polyrate-Gaussian Interface
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica Computacional
Medio de divulgación: Internet
Jingjing Zheng, Shuxia Zhang, José C. Corchado, Yao-Yuan Chuang, Elena L. Coitiño, Benjamin A. Ellingson, and Donald G. Truhlar

POLYRATE 2010-A (2010)

Software, Otra
JZ, E. Laura Coitiño, ROZEANNE STECKLER, BCG, ADI, DONALD G. TRUHLAR
Paquete para cálculo de cinética de reacciones químicas
País: Estados Unidos

Disponibilidad: Restricta

Producto con aplicación productiva o social: Predicción de la química de combustión en aplicaciones a la industria de automóviles, aeroespacial y electrónica

Institución financiadora: U. S. Department of Energy, Office of Basic Energy Sciences, Universidad de Minnesota

Palabras clave: modelado cinética VTST

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

<http://comp.chem.umn.edu/polyrate/>

POLYRATE 2010-A: Computer Program for the Calculation of Chemical Reaction Rates for Polyatomics Jingjing Zheng, Shuxia Zhang, Benjamin J. Lynch, José C. Corchado, Yao-Yuan Chuang, Patton L. Fast, Wei-Ping Hu, Yi-Ping Liu, Gillian C. Lynch, Kiet A. Nguyen, Charles F. Jackels, Antonio Fernandez Ramos, Benjamin A. Ellingson, Vasilios S. Melissas, Jordi Villà, Ivan Rossi, Elena L. Coitiño, Jingzhi Pu, Titus V. Albu Department of Chemistry and Supercomputing Institute University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota 55455 Rozeanne Steckler Northwest Alliance for Computational Science & Engineering Oregon State University, Corvallis, Oregon 97331 Bruce C. Garrett Environmental Molecular Sciences Laboratory Pacific Northwest Laboratory Richland, Washington 99352 Alan D. Isaacson Department of Chemistry and Biochemistry Miami University Oxford, Ohio 45056 and Donald G. Truhlar Department of Chemistry and Supercomputing Institute University of Minnesota, Minneapolis, Minnesota 55455 To obtain POLYRATE: The POLYRATE package is available for downloading (Web access only) through Donald G. Truhlar at the University of Minnesota. To obtain POLYRATE from Minnesota, print, fill out, and sign the license below and either fax it to him at 612-626-9390 or scan it and send it as an e-mail attachment to software@comp.chem.umn.edu. You will then receive the password required for downloading by email. POLYRATE distribution at Minnesota is currently being handled by Software Manager. POLYRATE 2010-A is not reverse compatible with all previous versions of the interface programs. New versions of these programs will be released. Earlier versions of the code that are still used in some derived codes are also available, in particular:

GAUSSRATE 2009-A (Version 2009-A/P2008-G09G03G98G94, Mayo 2010) (2010)

Software, Otra

J. ZHENG, SHUXIA ZHANG, JOSÉ C. CORCHADO, YAO-YUAN CHUANG, E. Laura Coitiño, BENJAMIN A. ELLINGSON, DONALD G. TRUHLAR

Interfase entre los paquetes Polyrate 2008 y Gaussian09 para correr cinética por dinámica directa

País: Estados Unidos

Disponibilidad: Restricta

Producto con aplicación productiva o social: estudios de cinética de procesos de combustión y en sistemas de interés biológico

Institución financiadora: University of Minnesota

Palabras clave: software para cinética VTST

Áreas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

<http://comp.chem.umn.edu/gaussrate/>

GAUSSRATE 2009-A Jingjing Zheng, Shuxia Zhang, José C. Corchado, Yao-Yuan Chuang, Elena L. Coitiño, Benjamin A. Ellingson, and Donald G. Truhlar Department of Chemistry and Supercomputing Institute, University of Minnesota, Minneapolis, MN 55455-0431, USA To obtain GAUSSRATE: The GAUSSRATE package is available for downloading (Web access only) through Donald G. Truhlar at the University of Minnesota. To obtain GAUSSRATE from Minnesota, please fill out the online license form at the link below. You will then receive the password required for downloading by email. GAUSSRATE distribution at Minnesota is currently being handled by Software Manager. GAUSSRATE-version 2009-A user or group license form GAUSSRATE-version 2009-A site license form Download GAUSSRATE-version 2009-A

Polyrate 9.7 (2007)

Software, Otra

E. Laura Coitiño, DONALD G. TRUHLAR

Paquete para cálculo de cinética de reacciones químicas

País: Estados Unidos

Disponibilidad: Restricta

Producto con aplicación productiva o social: Industria

Institución financiadora: University of Minnesota

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional, Cinética Química
Medio de divulgación: Internet
<http://comp.chem.umn.edu/polyrate/>

DDUtilities (1999)

Software, Otra
MOLLI NOLAND , E. Laura Coitiño , YAO-YUAN CHUANG , DONALD G. TRUHLAR

País: Uruguay
Institución financiadora: University of Minnesota
Palabras clave: Utilidades de apoyo a Polyrate
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Computacional, Cinética Química
Medio de divulgación: Internet
<http://comp.chem.umn.edu/ddutil/>
anuario 1999 DDUTILITIES 1.1/P7.0-G94 Program Date: April 7, 1997 Manual Date: January 20,
1999 by Molli Noland, Elena Laura Coitino, Yao-Yuan Chuang, and Donald G. Truhlar Department
of Chemistry and Supercomputing Institute, University of Minnesota, Minneapolis, MN 55455-
0431

GAUSSRATE versions 7.2-7.3 (1997)

Software, Otra
JOSÉ C. CORCHADO , E. Laura Coitiño , YAO-YUAN CHUANG , DONALD G. TRUHLAR
(An interface for running Direct Dynamics Calculations Using Modular versions of POLYRATE and
GAUSSIAN94 Codes
País: Estados Unidos
Disponibilidad: Restricta
Institución financiadora: University of Minnesota
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Internet
<http://comp.chem.umn.edu/WWW/GAUSSRATE/GAUSSRATE.html>

POLYRATE versions 7.0-9.1 (A Program for Calculating Variational Transition State Theory Chemical Rates with Semiclassical Tunneling). (1996)

Software, Otra
DONALD G. TRUHLAR , E. Laura Coitiño
Mejoras al programa de cálculo principal para el uso de la teoría variacional del estado de transición
País: Estados Unidos
Disponibilidad: Restricta
Producto con aplicación productiva o social
Institución financiadora: University of Minnesota
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Internet
<http://comp.chem.umn.edu/WWW/POLYRATE/POLYRATE.html>
El número de autores es extenso. Mis aportes arrancan en el año 1996, durante la estancia
postdoctoral en el grupo del Prof. D.G. Truhlar en la Universidad de Minnesota.

Programa MGPIA94 (1994)

Software, Otra
E. Laura Coitiño , ROSSANA BONACCORSI , ROBERTO CAMMI
Incorporación de nuevas extensiones del modelo PCM del Solvente al programa
MONSTERGAUSS87
País: Italia
Disponibilidad: Restricta
Producto con aplicación productiva o social
Institución financiadora: CEE y Universidad de Pisa
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,

Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Medio de divulgación: Disquetes
No disponible

Otras Producciones

CURSOS DE CORTA DURACIÓN DICTADOS

Data Mining en Quimi y Bioinformática (2007)

E. Laura Coitiño, O. VIERA, H. NAYA, F. CAPDEVIELLE, PABLO D. DANS
Especialización
País: Uruguay
Idioma: Español
Medio divulgación: Papel
Tipo de participación: Organizador
Unidad: Facultad de Ciencias
Duración: 2 semanas
Lugar: Facultad de Ciencias
Ciudad: Montevideo
Institución Promotora/Financiadora: Facultad de Ciencias
Palabras clave: Químico y Bioinformática Minería de Datos Procesamiento de información bioquímica
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Quimioinformática/Bioinformática/Minería de Datos

Bioinformática Estructural: Visualización y diseño asistido por PC de la estructura 3D de moléculas y macromoléculas (2002)

E. Laura Coitiño
Especialización
País: Uruguay
Idioma: Español
Medio divulgación: Papel
Web: <http://lqtc.fcien.edu.uy/>
Tipo de participación: Organizador
Unidad: Laboratorio de Química Teórica y Computacional
Duración: 2 semanas
Lugar: Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Liceo 1 de Trinidad
Ciudad: Montevideo e interior semipresencial
Institución Promotora/Financiadora: Facultad de Ciencias, Universidad de la República
Palabras clave: bioinformática estructural visualización molecular
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / bioinformática estructural
Información adicional: El curso se ha dado desde el año 2002 en adelante hasta 2007, dirigido esencialmente a profesores de secundaria y universidad, contando con el equipo docente del LQTC en Facultad de Ciencias, y ex-colaboradores. En el corriente año se está confluendo con otra iniciativa planteada en Facultad de Ciencias por la Dra. Adriana Estevez, de la Sección Bioquímica

DESARROLLO DE MATERIAL DIDÁCTICO O DE INSTRUCCIÓN

Química de la Atmósfera y Polución (2003)

E. Laura Coitiño
País: Uruguay
Idioma: Español
Medio divulgación: CD-Rom
Libro de texto en producción. Caps 1-4, 210 pp.
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Tierra y relacionadas con el Medio Ambiente / Meteorología y Ciencias Atmosféricas / Química de la atmósfera limpia y contaminada
Información adicional: El libro fue desarrollado inicialmente para su uso en soporte CD y acceso a través de Internet para el curso homónimo de posgrado, recibiendo apoyo parcial de la Comisión Sectorial de Educación Permanente (2001). Entre 2002-2003 se trabajó en su elaboración en formato impreso, disponiéndose en forma final de los primeros 4 capítulos (210 pp.), y restando culminar los 2 últimos. Este trabajo quedó trunco en 2004 a raíz de atravesar serios problemas de

salud, pero se pretende concluir en algún momento.

ORGANIZACIÓN DE EVENTOS

XXXVIII Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2002)

E. Laura Coitiño
Congreso
Sub Tipo: Organización
Lugar: Uruguay ,Radisson Victoria Plaza Montevideo
Idioma: Español
Medio divulgación: Internet
Duración: 1 semanas
Evento itinerante: SI
Institución Promotora/Financiadora: Asociación Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Información adicional: Organización del evento - Miembro del comité organizador

Evaluaciones

EVALUACIÓN DE PROYECTOS

EVALUACIÓN INDEPENDIENTE DE PROYECTOS

Programa MARCA - MERCOSUR (2011 / 2011)

Uruguay
Programa MARCA - MERCOSUR
Cantidad: De 5 a 20
Evaluación de proyectos nacionales (Uruguay) del programa MARCA 2011

CSE-UdelaR (2010 / 2010)

Uruguay
CSE-UdelaR
Cantidad: Menos de 5
Evaluación de propuestas de Facultad de Ciencias para varias convocatorias de CSE con presentación de proyecto institucional.

CONICYT (2006)

Uruguay
CONICYT
Cantidad: Menos de 5
Evaluación de Perfiles y Proyectos para la convocatoria del CONICYT del año 2006 en el área Básica

CSIC (2006 / 2006)

Uruguay
CSIC
Cantidad: De 5 a 20
Integrante de la Comisión Evaluadora del Área Básica - Convocatoria a Proyectos I+D y de iniciación a la investigación 2006.

EVALUACIÓN DE PUBLICACIONES

COMITÉ EDITORIAL

European Journal of Medicinal Chemistry (2010 / 2011)

Cantidad: Menos de 5

Journal of Organic Chemistry (2007 / 2013)

Cantidad: Menos de 5

Journal of Physical Chemistry (1997 / 2007)

Cantidad: De 5 a 20

Journal of the American Chemical Society (1997 / 1997)

Cantidad: Menos de 5

Gazzeta Chimica Italiana (1992 / 1992)

Cantidad: Menos de 5

REVISIONES

Parasitology Research (2017)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Evaluación de trabajos de modelado molecular (dinámica molecular) de proteínas relevantes a parasitosis

Journal of Molecular Graphics and Modelling (2015)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Biochemistry - American Chemical Society (2012 / 2015)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: Menos de 5

Referato de artículos completos

Journal of Molecular Modeling (2010 / 2017)

Tipo de publicación: Revista

Cantidad: De 5 a 20

Referato de trabajos completos. Integrada como Editora Asociada de la Revista en diciembre 2016

EVALUACIÓN DE EVENTOS Y CONGRESOS

5° Encuentro Nacional de Química, ENAQUI 5 (2017)

Revisiones

Uruguay

PEDECIBA-Química

Integrante del Comité Científico. Evaluación de resúmenes de 6 trabajos para su admisión para el congreso 2017. Evaluación de 7 posters de estudiantes para premiaciones a mejor trabajo

XLIII Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression - CHITEL 2017 (2017)

Comité programa congreso

Francia

Arbitrado

Sorbonne Universités, CNRS, Francia

Como miembro del Comité Científico internacional participé en la propuesta y selección de keynote speakers del congreso. También participé en la evaluación de resúmenes de trabajos a presentar en formato poster.

42do Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina - Organizadora, Co-Chair evento (2016)

Comité programa congreso

Uruguay
Arbitrado

UdelaR, IPMON

Nos encontramos trabajando en la organización del evento actualmetne (enero 2016). Integro el Comité Organizador, como co-chair, con responsabilidad en la selección de conferencistas invitados y el programa general de actividades científicas.

Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology -SBF.uy+SAB - Co-chair sesión, organizadora, evaluación posters (2015)

Comité programa congreso
Uruguay
Arbitrado

International Union of Pure and Applied Biophysics

Evaluación de trabajos, resúmenes, y posters durante el desarrollo de la jornada. Co-chair de sesión junto al Prof. Darío Estrín.

Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology - Salto, Organizadora, Chair de sesión, evaluadora trabajos (2015)

Comité programa congreso
Uruguay
Arbitrado

UdelaR, IPMON, ANII, IUPAB, SBFuy, SAF

Integré el comité organizador del evento desde su inicio, participando en el diseño del programa, selección de conferencistas, chair de sesión y evaluación de trabajos presentados en formato poster.

2das Jornadas +Biofísica - congreso nacional de la seccional SBF.uy - Montevideo, 2013 - chair de sesión, evaluadora de trabajos (2013)

Revisiones
Uruguay

UdelaR, IPMON

Actué como chair de sesión en Biofísica Computacional, seleccionando las conferencias orales invitadas (PProf. Dr. Ma. Joao Ramos) y trabajos orales seleccionados. Evalúe posters de estudiantes en una sesión para otorgar el premio al mejor trabajo del congreso

38vo Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina - Quitel 2012 - Natal, Brasil- Evaluación de posters (2012)

Revisiones
Brasil

Universidad Federal

Evalúe trabajos contribuidos en formato poster para la asignación del premio al mejor trabajo (2 sesiones).

28vo Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina - Montevideo 2002 (2002)

Comité programa congreso
Uruguay
Arbitrado

UdelaR

Integré el Comité Organizador, participé en la definición del programa y selección de conferencias invitadas y contribuidas.

EVALUACIÓN DE CONVOCATORIAS CONCURSABLES

Becas para Pasantías en el Exterior 2018 (Movilidad para Capacitación) ANII (2018)

Evaluación independiente
Uruguay
Cantidad: Menos de 5
Agencia nacional de innovación e investigación

CSIC I+D Básica (2006)

Comité evaluador
Uruguay
Cantidad: De 5 a 20
CSIC-UDelaR

Conicyt - Perfiles de proyectos y proyectos para Fondo Clemente Estable (2006)

Evaluación independiente
Uruguay
Cantidad: Menos de 5
Ministerio de Educación y Cultura

JURADO DE TESIS

Doctorado en Química (2018)

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

Doctorado en Ciencias Biológicas- PEDECIBA-UdelaR (2014)

Jurado de mesa de evaluación de tesis
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Evalué una tesis de doctorado (M.Sc. Agustín Correa) titulada "Diseño e implementación de nuevas herramientas para la solubilización, evolución y cristalogénesis de proteínas" como integrante del tribunal designado por el PEDECIBA-Biología.

Doctorado en Química - FCEN-UBA (2002)

Jurado de mesa de evaluación de tesis
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad de Buenos Aires / Facultad de Ciencias Exactas y Naturales , Argentina
Nivel de formación: Doctorado

Formación de RRHH

TUTORÍAS CONCLUIDAS

POSGRADO

Peroxirredoxinas: Eficientes reductoras de peróxidos, eficientemente reducidas por tiorredoxinas. Papel de los aminoácidos conservados en el ciclo catalítico y sobreoxidación de Prx5 - Beca CAP doctoral 2016-2018 (2018)

Tesis de doctorado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR , Uruguay
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Lic. Stephanie Portillo
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Peroxiredoxina 5 reactividad mecanismo
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Posgrado en Química iniciado en 2013. Defensa exitosa de pasaje de Maestría a Doctorado desarrollada el 23/06/15 (Tribunal: Cecilia Giacomini, Gustavo Salinas y Oscar Ventura) Actúo como Directora Académica y Directora de Tesis (esta última función compartida con Gerardo Ferrer-Sueta, quien orienta la componente experimental de la tesis). Tuvo beca de posgrado de CAP-UdelaR 2013-2015 y obtuvo beca de Doctorado por el período 2016-2018 del programa de becas de posgrado nacional de la ANII y de CAP-UdelaR, asumiendo la segunda.

Albúmina Sérica Humana: oxidación del tiol y glicación (becas ANII Maestría 2012-2014, Doctorado 2014-2016) (2017)

Tesis de doctorado

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

Programa: Doctorado en Química

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Lic. Jenner Bonanata

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Mecanismos de reacción modelado QM/MM y MD de proteínas modific. postraduccion de HSA-oxidación+glicación)

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Enzimología experimental y computacional

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

Tesis de Doctorado en Química del Lic. Jenner Bonanata, actuando como Directora Académica y de tesis, co-dirigida con la Dra. Beatriz Alvarez (Enzimología Experimental). Estos estudios iniciados en 2011, se extendieron hasta diciembre 2013 como estudios de Maestría en Química, realizándose con éxito la defensa para el pasaje de Maestría a Doctorado el 19/12/13. De marzo 2014 a setiembre 2016 tuvo una beca de doctorado ANII para completar sus estudios de posgrado e ingresó al SNI como candidato a investigador en 2016. La defensa de tesis tuvo lugar el 11/09/17 con tribunal constituido por los Dres. Andrea Villarino (FCIEN, UdeLaR), Oscar N. Ventura (FQ, UdeLaR) y Darío Estrín (FCEN, UBA, Argentina) obteniendo una calificación de Sobresaliente (12/12).

Estudio molecular del gen de la enfermedad de von Hippel-Lindau (VHL): detección de portadores y caracterización funcional de nuevas variantes génicas - Estudio in silico de complejos pVHL (WT y mutantes) (2016)

Tesis de doctorado

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

Programa: Doctorado en Bioquímica

Tipo de orientación: Asesor/Orientador

Nombre del orientado: M.Sc. Cecilia Mathó

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Argentina, Español

Web: <http://www.cedie-conicet.gob.ar/matho-cecilia/>

Palabras Clave: complejo multiproteico VBC-HIF mutaciones in silico de pVHL Enfermedad de von Hippel-Lindau simulaciones MD y MMPB(GB)SA

Areas de conocimiento:

Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Clínica / Endocrinología y Metabolismo

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

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

Actividad desarrollada bajo mi supervisión científica en el LQTC-IQB-FC-UdeLaR entre 2011 y 2015, encuadrada en el Doctorado en Bioquímica desarrollado en Argentina por la M.Sc. Mathó (tutoras de tesis: Dra. Patricia Pennisi y Gabriela Sansó, CEDIE-CONICET) colaborò además la Dra. A. Merlino del LQTC. La actividad respondió a la solicitud que me planteó en 2011 la M.Sc. Mathó de adquirir entrenamiento y realizar estudios in silico del efecto de mutaciones de la proteína pVHL (enfermedad de von Hippel-Lindau) que segregan con el fenotipo de la enfermedad que caracterizó funcionalmente en su tesis sobre la capacidad de reconocimiento de la proteína HIFalfa en complejos VBC. El diseño del trabajo estuvo en mis manos y la Dra. Merlino del LQTC apoyò en la producción de resultados. A partir de 2013 se incorporó formalmente esta colaboración al plan de doctorado de la M.Sc. Mathó y se incluyeron los resultados in silico como una parte significativa de su tesis, defendida en la UBA, Facultad de Farmacia y Bioquímica el 07/07/2016, con calificación de Sobresaliente 10/10.

Estudio teórico-experimental de la glicación temprana en Histona H1 y ADN por ribosas y metilgloxal y la sinergia con su oxidación- Becas ANII y CAP Maestría 2016-2018-Interumpida al 50% por la estudiante (2016)

Tesis de maestria

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

Programa: Magister en Química

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Lic. Florencia Klein

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Glicación Histona H1- ADN metilgloxal sinergia glicación-oxidación ribosa

Áreas de conocimiento:

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

El Proyecto de Plan de Estudios y Tesis de Klein fue aprobado por el Consejo de Facultad de Química el 18/06/15, actuando quien escribe como Directora Académica y de Tesis única en el Laboratorio de Química Teórica y Computacional de Facultad de Ciencias. La estudiante reunió durante el primer año de estudios casi el 80% de los créditos de cursos (37/50) siendo apoyada económicamente por quien escribe (partida de DT) para cursar en la UBA y destinando tiempo de su contrato como Gr.1, 20 hs en el LQTC a avanzar en sus estudios de posgrado. Desarrolló investigación inicial del plan, generando resultados originales para sostener una presentación en reunión Latinoamericana de nov. 2015 para la que recibió beca y no asistió (el poster fue presentado por quien escribe como su tutora). Postuló con el tema de su tesis por apoyo CSIC Iniciación 2015, proyecto aprobado académicamente sin financiar (CSIC financió en la misma convocatoria un proyecto de otra estudiante de doctorado bajo mi orientación) y postuló y obtuvo becas 2016-2018 de Maestría ANII (dic.2015) y Maestría CAP-UdelaR (marzo 2016), siendo admitida como estudiante de posgrado del PEDECIBA-Química en octubre 2015. En marzo 2016 estos estudios fueron interrumpidos por la estudiante, al obtener un contrato en el Instituto Pasteur que le exigiera iniciar un posgrado diferente con el Dr. Sergio Pantano, incompatible con el que ya tenía en curso casi al 50%. Se le propuso honrar sus compromisos previos defendiendo la Maestría en plazo mínimo, aprovechando una de las dos becas obtenidas antes de vincularse al nuevo posgrado, pero tras realizar ese acuerdo, hizo abandono del cargo y todas las actividades, por lo que formalmente se dio por cerrada esta experiencia en mayo 2016.

Peroxirredoxinas: eficientes reductoras de peróxidos, eficientemente reducidas por tiorredoxinas. Función de los aminoácidos conservados en la especificidad de ambas reacciones.(con beca CAP 2013-2015) (2015)

Tesis de maestría

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

Programa: Magister en Química

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Lic. Stephanie Portillo

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: oxidación de tioles reactividad en enzimas modelado QM/MM y MD de proteínas

Áreas de conocimiento:

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

La estudiante fue aceptada en el Posgrado en Química en mayo 2013, iniciando como candidata a Maestría. Se designó en mayo 2015 tribunal para su defensa oral de pasaje a Doctorado en Química (Ventura, Salinas, Giacomini). Actuó como Directora Académica del Posgrado y compartió con el Dr. Gerardo Ferrer-Sueta la dirección de la tesis, siendo éste último responsable de orientar la componente experimental de la misma y quien escribe la de modelado.

Respuestas asociadas al déficit hídrico en leguminosas :acumulación de prolina y estrés nitro-oxidativo (2014)

Tesis de doctorado

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

Programa: Doctorado en Ciencias Biológicas (UDELAR-PEDECIBA)

Tipo de orientación: Asesor/Orientador

Nombre del orientado: Lic. Santiago Signorelli

Medio de divulgación: Internet

País/Idioma: Uruguay, Español

Web: <https://www.colibri.udelar.edu.uy/handle/123456789/6461>

Palabras Clave: Modelado computacional Prolina en estrés vegetal Mecanismo de captura de radicales OH

Áreas de conocimiento:

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

Orienté entre 2011 y 2014 el trabajo de investigación del Lic. Signorelli de modelado computacional del mecanismo de reacciones del radical hidroxilo con prolina, cuyos resultados fueron incorporados a la Tesis Doctoral del mismo, defendida en Facultad de Ciencias en febrero 2015. Las actividades de modelado computacional, que dieron sustento a dos artículos publicados en 2014 y 2015 fueron diseñadas por mi junto al estudiante de posgrado y desarrolladas en una primera fase como pasantía en el LQTC, haciendo uso de los recursos materiales (software Gaussian09/Gaussview y y equipamiento de cálculo) en nuestras instalaciones en 2011. A partir de 2012 ayudé al estudiante a ganar autonomía en el trabajo, en la adquisición por su proyecto ANII de un servidor de cálculo que configuré y en el que instalé y le facilité copia de nuestro software científico, sobre el cual continuó la producción entre 2012 y 2014 en Facultad de Agronomía,

siempre bajo mi orientación y realizando todo el análisis e interpretación de los resultados mecanísticos junto a quien escribe. Los Directores de Tesis fueron los Dres. Jorge Monza, Omar Borsani y Javier Corpas, especialistas en la componente biológica.

Estudio experimental y modelado computacional de propiedades del tior de la Albúmina Sérica Humana y sus derivados (beca ANII: POS_2011_1_3287 desde 01/03/2012)) (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: Lic. Jenner Bonanata
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: integración enfoques teórico-experimental albumina y sus transformaciones
Espectros FTIR Modelado de la reactividad de tioles en proteínas
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Propiedades redox de tioles en proteínas
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica redox de tioles en proteínas
Se comparte la tutoría de la tesis (que integra una componente central de trabajo de modelado computacional, área en la que quien suscribe viene formando y orientando al Lic. Bonanata desde el pregrado y en beca de iniciación de la ANII, con trabajo experimental) en pie de igualdad con la Dra. Beatriz Alvarez del Laboratorio de Enzimología, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias. El estudiante ha recibido beca de posgrado nacional por el período marzo 2012-marzo 2014. concretó con éxito la defensa oral del pasaje a doctorado el 19/012/13.

Modelado de las características estructurales y mecanismo de acción molecular de compuestos de Pd(II) y Pt(II) con potencial acción antineoplásica (2008)

Tesis de doctorado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay
Programa: Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA)
Nombre del orientado: Pablo Dans
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Modelado Computacional de Sistemas Químicos Anticancerígenos de Pt(II)
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Nov. 2001 - Nov. 2005 - Trabajo de producción de la tesis de posgrado. Set. 2005 - Admisión formal al doctorado (tribunal Ventura, Manta, Kremer) Marzo 2007 - Se recibe una primer versión completa del documento de tesis. Agosto 2007 - Se envía el documento de tesis en versión final corregida y avalada a la Comisión de Posgrado de Facultad de Química. La designación de tribunal para defensa queda en suspenso hasta que el estudiante apruebe varios exámenes pendientes de su plan de estudios, situación que concreta a octubre de 2008. 12/12/08 - Defensa final. Tribunal: Ventura, Cerecetto, Estrín. Excelente. Marzo 2009 - Homologación del fallo por el Consejo de Facultad de Química

Modelado de las características estructurales y mecanismo de acción molecular de compuestos de Pd(II) y Pt(II) con potencial acción antineoplásica (2003)

Tesis de maestría
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay
Programa: Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)
Nombre del orientado: Pablo Dans
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Compuestos cuadrado planos de Pt(II)/Pd(II)
Areas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / diseño y optimización de fármacos in silico
Culminados todos los cursos, actividades curriculares y trabajo de tesis planificado, el estudiante hizo su presentación oral previa a la defensa (tribunal Ventura, Coitiño, Cerecetto, Calificación

12/12) en octubre 2003. En lugar de presentar el documento de tesis, solicitó pasaje al nuevo régimen de posgrado, validando los 5 semestres de estudios realizados como la primera parte de sus estudios. Su propuesta fue aceptada en diciembre 2004 y la admisión al nivel Doctoral tuvo lugar en agosto 2005 (tribunal Kremer, Manta, Ventura).

Modelado de los procesos de combustión del metanol como combustible limpio para el ambiente (1999)

Tesis de maestría
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR, Uruguay
Programa: Maestría en Química (UDELAR-PEDECIBA)
Nombre del orientado: Leonidas Carrasco
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: modelado de procesos de combustión
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Orgánica
El candidato cubrió sólo 2 de 4 semestres de actividades curriculares previstos en su plan de estudios, desde marzo 1998 a marzo 1999. Tomó los cursos complementarios del primer semestre de su plan de estudios (que fueron ofrecidos y sostenidos en su totalidad por su orientadora en 1998) y abandonó los estudios sin dar aviso luego de no obtener una beca del PEDECIBA y no lograr aprobar las actividades curriculares cursadas (algo necesario para cumplir las previsiones de las finales). Los avances del trabajo de investigación de la tesis fueron presentados por su orientadora en un congreso internacional en Puebla, México, en setiembre 1998. Se informó al Consejo Científico del PEDECIBA y a la Comisión de Magister y Doctorado de la situación, formalizando su cierre con claridad en marzo 1999.

GRADO

Modificaciones post-traduccionales en la enzima peroxiredoxina 6 humana (hPrdx6): consecuencias de su fosforilación y glicación (2018)

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR / Laboratorio de Química Teórica y Computacional, Uruguay
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Santiago Sastre
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Peroxiredoxina 6 PTMs: Fosforilación/Glicación Modelado y Simulación computacional
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bioquímica de proteínas
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional, Bioinformática Estructural
Tesina de graduación. Inicio mayo 2017, culminación en abril 2018. El estudiante concretó la exposición del trabajo de tesina con éxito en las Jornadas de Seminarios del IQB-FCIEN, UdeLaR el 08/12/2017. Presentó el documento de tesina para evaluación externa el 20/04/18. Obtuvo una calificación final de 11/12 (evaluador externo Dr. Ari Zeida). Quien escribe actuó como tutora principal, en co-tutoría con la Lic. Stephanie Portillo una de mis estudiantes de doctorado.

Estudio in silico de la reacción TioI-Michael del ácido nitrolinoleico conjugado (NO2CLA) y tioles en medio acuoso y en PPAR γ (2018)

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR / Laboratorio de Química Teórica y Computacional, Uruguay
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Alexander Cantou
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: reacción de Michael mecanismo Nitrolinoleico conjugado tioles PPAR γ
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica
Tesina de la Licenciatura en Bioquímica. Iniciada formalmente en octubre 2016, ya está en fase final de redacción del documento de tesina. Tutora única entre octubre 2016 y marzo 2017, a partir de esa fecha se contó con el apoyo de la Lic. Stephanie Portillo (a oficializar como co-tutora al momento de la entrega de la tesina para evaluación). La exposición oral de la tesina se cumplió por parte del

estudiante con éxito el pasado 08/12/2017 en las Jornadas de Seminarios del IQB-FCIEN, UdelaR. La tesina se presentó el 23/03/18, obtuvo una calificación final de 11/12 (Evaluadora externa Dra. Patricia Sáenz)

Aportando piezas clave para entender el mecanismo de apertura de la glucopiranososa en seroálbumina humana camino a su glicación en Lys195 (2016)

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR, Uruguay
Programa: Licenciatura en Bioquímica
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Federico Ortiz Astigarraga
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Modelado computacional Glicación Albúmina Sérica humana Glucosa, apertura Diabetes
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Bioinformática
Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular / Modificación post-traducción de proteínas séricas
Mecanismos básicos y efectos de la glicación de proteínas por glucosa asociados a diabetes. Co-tutor del trabajo: Lic. Jenner Bonanata. Tesina concluida y presentada formalmente, en etapa de evaluación externa.

Estudio de la glicación temprana de Histona H1 como posible blanco para la inhibición por fármacos y marcador para diagnóstico en patologías humanas (2015)

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR, Uruguay
Programa: Licenciatura en Bioquímica
Nombre del orientado: Florencia Klein
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Glicación histona H1 linker blancos farmacológicos-identificación
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica, Bioinformática Estructural
Tutora única. Concluida en marzo 2015. En evaluación

Interacciones entre el ácido araquidónico y el receptor nuclear PPARgamma: caracterización por modelado computacional y monitoreo de genes reporteros (2014)

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR, Uruguay
Programa: Licenciatura en Bioquímica
Nombre del orientado: Victoria Veroli
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Modelado computacional ácidos grasos nitrados interacción con PPAR gamma
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Inmunoensayos
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Trabajo de tesis de graduación iniciado en 2012 en co-tutoría con la Prof. Ana Ferreira en el Instituto de Higiene de la Facultad de Medicina, en el contexto más amplio de la cooperación que mantiene el grupo que dirijo con el grupo del Prof. Homero Rubbo desde 2010. La Prof. Ferreira orienta la parte experimental de determinación de activación de PPAR por nitrolípidos en distintos tipos de líneas celulares principalmente para el caso de derivados nitrados del ácido araquidónico y quien escribe lo hace para la parte de modelado computacional de las interacciones entre el sitio de unión LBD de PPAR gamma y derivados nitroaraquidónico.

Inhibición de peroxiredoxinas: un enfoque teórico-experimental (2012)

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR,

Uruguay
Programa: Licenciatura en Bioquímica
Nombre del orientado: Stephanie Portillo
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: peroxiredoxinas inhibición docking y modelado QM/MM
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Biológica -Química Teórica y Computacional
Trabajo de graduación en co-tutoría con el Dr. Gerardo Ferrer (Laboratorio de Físicoquímica Biológica, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias). Inicio agosto 2010-Culminada Mayo 2012 Evaluadora externa: Madia Trujillo Calificación Final: 12/12

Modelado del proceso de formación de radicales etanolaminilo en el sitio activo de EAL/B12 (2010)

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Programa: Licenciatura en Bioquímica
Nombre del orientado: Jenner Bonanata
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: formación de radicales EAL/B12 DFT B3LYP PCM
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Tesina desarrollada de agosto 2009 a Julio 2010. En proceso de presentación para su evaluación final externa. Calificación tutora: 12/12.

Efectos de la glicación del residuo K16 sobre la estructura y propiedades fisicoquímicas del fragmento 10-35 del péptido beta-amiloide (2009)

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Programa: Licenciatura en Bioquímica
Nombre del orientado: Tamara Meirelles
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: modelado de la glicación de péptidos y proteínas Simulaciones de dinámica molecular Cálculos mixtos ONIOM DFT/AMBER
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, péptidos y glicación en patologías
Tesina de graduación de la Licenciatura en Bioquímica - Un mínimo de 90 hs de actualización bibliográfica y un mínimo de 280 hs de trabajo de experimental de investigación, con presentación de reporte final en formato artículo, evaluado externamente. Tutor único, dentro de proyecto de investigación de mi autoría. Calificación final: 11/12 La estudiante fue admitida en 2010 para desarrollar sus estudios doctorales en el área de modelado en el grupo de la Prof. Jill Gready en la Australian National University (Camberra).

Fisicoquímica Moderna; Termoquímica y Cinética Computacional; Predicción y análisis in silico de estructura de proteínas (2009)

Docente adscriptor/Practicantado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Nombre del orientado: Stephanie Portillo
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Nitración de ácidos grasos Efectos del medio DFT PCM
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Inicio a la investigación de la por entonces Bach. Stephanie Portillo, en el contexto de su contrato como Ayudante, 20 hs/sem. en el LQTC, ingresando a la carrera docente en la UdeLaR. En julio 2010 se incorporó al trabajo realizado para una presentación sobre anticancerígenos de Pt(IV) comunicada en un congreso internacional en España, y dentro del mismo tema, aportó para la elaboración de un proyecto CSIC de investigación estudiantil. Desde marzo 2010 y hasta 2012 en forma activa su trabajo se integró a una línea de cooperación con trabajo experimental conducida por los Dres. Homero Rubbo y Andrés Trotchansky en Facultad de Medicina sobre propiedades

físicoquímicas de nitroalquenos de ácidos grasos, con participación en varias comunicaciones a congresos entre 2011 y 2013. En 2012 esa línea es tomada por otra estudiante del grupo, Victoria Veroli y se concentra en actividades ligadas a Peroxiredoxinas, su eficiencia catalítica y su eficiencia redox, en la que desarrolló su tesina de graduación e inició estudios de posgrado (2013-2015 a nivel de Maestría, desde entonces a nivel doctoral). En 2015 se trabajó y acompañó en su preparación para encargarse de temas de Termodinámica Estadística y cinética. En 2016, ya como Asistente del Laboratorio está volviendo a colaborar con estudios de nitroalquenos de ácidos grasos y tioles, trabajando en una primer experiencia de co-orientación de un estudiante de grado y participa en teórico-prácticos de dos cursos de posgrado.

Varias temáticas, ver información adicional - Pasante y Ayudante Gr. 1, 20 hs del LQTC, 2007-2009. Colaborador externo 2010-2011 (2007)

Docente adscriptor/Practicantado

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

Nombre del orientado: Santiago Signorelli

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Abstracción de H de etanolamina Cinética VTST Modelos reducidos - PCM

Solvatación de moléculas simples

Áreas de conocimiento:

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

Computación / Química Teórica y Computacional

Inicia en 2007 pasantía de investigación bajo orientación de quien escribe como estudiante avanzado de la Lic. en Bioquímica, asumiendo en 2008 un contrato de Ayudante del LQTC por un año, mediante concurso de méritos y pruebas, dejando el cargo en abril 2009. Trabajó inicialmente en la caracterización de energética y cinética de un modelo reducido del proceso de abstracción de H del sustrato del sistema etanolamina amonio liasa/B12, incorporándose su contribución a una comunicación a congreso internacional concretada en 2010, y a un artículo aceptado en abril 2011 para publicación con modificaciones en la revista Computational & Theoretical Chemistry. Hacia mediados de 2008, comenzó a trabajar en la determinación de la energía de solvatación y coeficientes de reparto de una serie de pequeñas moléculas di y triatómicas, labor que originó un trabajo presentado por él mismo en Chile y por la Dra. Denicola en USA en el año 2009, que hemos publicado en Archives of Biochem. Biophys. en 2011.

Interface para integración del software POLYRATE - Proyecto final Ingeniería en Sistemas - InCo (2006)

Tesis/Monografía de grado

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

Programa: Ingeniería en Computación

Nombre del orientado: Marcos Campot, Jorge Pena, Alfonso Vicente

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Polyrate - desarrollo de una GUI

Áreas de conocimiento:

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

Computación / Química Teórica y Computacional

Análisis Comparativo del mecanismo de reacción del glioxal con metilamina y aminoguanidina y el papel del solvente en ellos: una primer aproximación a las etapas iniciales de la glicación y su inhibición (2005)

Tesis/Monografía de grado

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

Programa: Licenciatura en Bioquímica

Nombre del orientado: Vanessa Leone

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: papel del agua como catalizador modelos cuánticos y PCMGlicación: reacción de aminas con glioxal

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Físicoquímica Orgánica

Trabajo Especial II del Plan 1992 de la Licenciatura 280 hs de actividad de investigación mínimas Trabajo presentado en formato artículo científico, aprox. 30 pp Calificación 12/12 La estudiante fue presentada en 2004 y admitida en 2005 bajo mi recomendación (y con un inicio de co-supervisión de la tesis, que luego se descartó debido a la baja comunicación existente) para realizar estudios doctorales en el área de modelado en el grupo del Prof. Paolo Carloni, en el International School of Advanced Studies (ISAS-SISSA) Trieste, Italia. Concluyó sus estudios exitosamente obteniendo el Ph.D. en Noviembre 2009. Actualmente desarrolla un post-doctorado en Alemania.

Fuente de la juventud: compuestos inhibidores del envejecimiento natural y patológico asociado a glucosilación no enzimática (2004)

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Programa: Licenciatura en Bioquímica
Nombre del orientado: Vanessa Leone
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: glicación, envejecimiento y patologías
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Bases moleculares del envejecimiento y patologías de concentración
Trabajo Especial I del Plan 1992 de la Licenciatura 90 hs de actividad de búsqueda y actualización bibliográfica monografía de aprox. 100 pp Calificación 12/12 Evaluador: Dr. Alfonso Cayota, Unidad de Patología Molecular, Facultad de Medicina.

Cationes radicales convencionales y distónicos y su relación con el mecanismo de reacciones catalizadas por el sistema enzima-coenzima B12 (2002)

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Programa: Licenciatura en Bioquímica
Nombre del orientado: Sylvia Vázquez
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: catálisis por sistemas enzima/B12 radicales convencionales y distónicos
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Procesos enzimáticos radicalarios
Trabajo Especial I - Plan 1992 de la Licenciatura en Bioquímica Iniciado en 2000 y culminado en 2002. Calificación final 8/12

Análisis de la reactividad intrínseca de nucleobases en secuencias de ADN relevantes frente a la acción de los fármacos anticancerígenos Cisplatino y Mitomicina C (2002)

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Programa: Licenciatura en Bioquímica
Nombre del orientado: Alexandra Castro
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: reactividad de ADN modulación del entorno local y global Modelado potenciales ionización
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Química Teórica y Computacional, Bioinformática estructural
Trabajo Especial II del Plan 1992 de la Licenciatura 280 hs de actividad de investigación mínimas Trabajo en formato artículo científico, aprox. 30 pp Calificación 10/12 Evaluador externo: Dra. Margot Paulino, Facultad de Química, UdeLaR.

Modelado de la unión covalente entre fármacos para el tratamiento del cáncer de la familia de Cisplatino y el ADN: análisis de la viabilidad molecular de compuestos alternativos de Pd(II) (2001)

Tesis/Monografía de grado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Programa: Licenciatura en Bioquímica
Nombre del orientado: Pablo Dans
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Modelado unión Cisplatino-ADN
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado de Compuestos Inorgánicos y su unión al ADN
Trabajo Especial II del Plan 1992 de la Licenciatura 280 hs de actividad de investigación mínimas Trabajo en formato artículo científico, aprox. 30 pp Calificación 12/12

Química del daño de ADN causado por acción de radicales oxigenados y nitrogenados (2001)

Tesis/Monografía de grado

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

Programa: Licenciatura en Bioquímica

Nombre del orientado: Alexandra Castro

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: daño oxidativo de ADN ROS y RNS

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / daño de ADN

Trabajo Especial I - Plan 1992 Licenciatura en Bioquímica 90 hs de revisión y actualización

bibliográfica Monografía de aprox. 80 páginas Calificación obtenida 11/12 Evaluador externo: Dr.

Ricardo Ehrlich, Sección Bioquímica, Facultad de Ciencias, UdeLaR.

Modelos teórico-computacionales para el estudio de sistemas bioquímicos (2000)

Tesis/Monografía de grado

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

Programa: Licenciatura en Bioquímica

Nombre del orientado: Pablo Dans

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Métodos de modelado para sistemas bioquímicos

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Trabajo Especial I - Plan de Estudios 1992. 90 horas de búsqueda y actualización bibliográfica en el

tema elegido. Se desarrolló entre 1999 y 2000 Documento final de 80 páginas. Calificación

obtenida 12/12

OTRAS

Pasantía curricular de inmersión en investigación para estudiantes de 4to años de Profesorado en Cs. Biológicas en Facultad de Ciencias, UdeLaR (2017)

Otras tutorías/orientaciones

Sector Enseñanza Técnico-Profesional/Secundaria/Público / Administración Nacional de Educación Pública / Instituto de Profesores Artigas , Uruguay

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Romina Bonavota; Denise Pérez; Nicolás Vanrell

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: epistemología enseñanza de la ciencia creación del conocimiento científico Biología y Bioinformática Estructural Proteínas, estructura, interacciones y función

Áreas de conocimiento:

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

Tutor de pasantía en el IPA: Dr. Daniel Fabián. Investigadora en LQTC-IQB, Facultad de Ciencias

Proteínas de la vida en salud y enfermedad: diabetes y fiebre del dengue. EFI Plataforma Educativa de Ciencias en Malvín Norte (2017)

Otras tutorías/orientaciones

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

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Natalia Larnaudie y Lucía Farías

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Estructura e interacciones de proteínas Estructura y función de péptidos/proteínas patologías humanas: diabetes

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica y Bioquímica Computacional

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

Bioquímica Computacional

Explorando el mecanismo catalítico de la Fumarato Reductasa-NADH dependiente de T. cruzi (2016)

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: Santiago Sastre

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Fumarato Reductasa Mecanismo catalítico NADH cofactor Rol de agua

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de reactividad y mecanismos de reacción de Michael

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

Pasantía experimental de iniciación a la investigación de 3er año Licenciatura en Bioquímica (110 hs de actividad de investigación) iniciada en marzo 2016. Tutora principal: Laura Coitiño Co-tutora: Alicia Merlino Este trabajo dio base para la producción de dos presentaciones, una en formato poster, expuesta por el estudiante en el 42 Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (Quitel2016) el 23/11/16 y en forma oral en las Jornadas de Seminarios del Instituto de Química Biológica el 13/12/16.

Caracterización de la modulación de la reactividad y mecanismo de reacción en procesos tio-Michael sobre el ácido graso NO₂CLA por cambios en la naturaleza del tiol (2016)

Otras tutorías/orientaciones

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

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Alexander Cantou

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: DFT-PCM reactividad de nitroalquenos de ácidos grasos modelado de mecanismos de reacción

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de reactividad y mecanismos de reacción de Michael

Pasantía de profundización de la Lic. en Bioquímica, electiva avanzada en modelado computacional de reacciones químicas. Inicio: marzo 2016. El estudiante ha solicitado iniciar su tesina de graduación en el área bajo orientación de quien escribe.

Modelado del mecanismo de ataque de Caspasa-3 sobre un sustrato representativo: disección de los efectos del entorno (2016)

Otras tutorías/orientaciones

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

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: Vera Skafar

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Modelado computacional Mecanismo catalítico Caspasa-3

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de estructura y propiedades de moléculas y macromoléculas

Pasantía de profundización electiva de 3er año Licenciatura en Bioquímica. Tutora: Alicia Merlino;

Co-tutora: Laura Coitiño

Caracterización de modificaciones de Histona H1 por glicación como blancos para detección y tratamiento de patologías humanas (beca INI_X_2012_1_4310) (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: Florencia Klein

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Glicación de Histonas Sinergia Glicación - Oxidación de Proteínas QM/MM de proteínas y modificaciones

Áreas de conocimiento:

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

beca INI_X_2012_1_4310 - desarrollada entre agosto 2013 y julio 2014

PAIE-CSIC: Modelado computacional de la interacción entre ácido oleico y alfa-Lactalbúmina en la formación de HAMLET y su búsqueda en la venganza antitumoral (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: S. Cancela-F. Ferraro- I. Mastandrea - F. Klein

Medio de divulgación: Internet

País/Idioma: Uruguay, Español

Web: http://www.csic.edu.uy/renderPage/index/pagelId/126#heading_4593

Palabras Clave: HAMLET - lactoalbúmina-oleico

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica

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

Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional

Proyecto PAIE - Programa de Apoyo a la Investigación Estudiantil - Comisión Sectorial de Investigación Científica (CSIC) - UdeLaR Quien escribe actúa como tutora principal, con la colaboración de la Dra. Alicia Merlino como co-tutora del proyecto.

En busca del origen de la reactividad diferencial frente a tioles de nitroalquenos de los ácidos grasos oleico, linoleico y linoleico conjugado (2014)

Iniciación a la investigación

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

Nombre del orientado: Camila Sagasti

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Web: <http://www.biociencias.org.uy/>

Palabras Clave: nitroalquenos de ácidos grasos reactividad diferencial

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica

Pasantía de iniciación a la investigación, enmarcada en las actividades electivas de la Licenciatura en Bioquímica. El trabajo cierra con presentación en Jornadas nacionales de la Sociedad Uruguaya de Biociencias en formato poster en 2014 y a posteriori, en 2016 contribuyó parcialmente a un estudio teórico-experimental, elaborado en colaboración con el Lab. de Enzimología, en fase de envío a mediados de 2016.

Profundizando en el conocimiento del mecanismo de la reacción de Michael entre nitroalquenos del ácido oleico y tioles (2014)

Iniciación a la investigación

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

Nombre del orientado: Diego Pérez-Escanda

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Web: <http://www.biociencias.org.uy/>

Palabras Clave: nitroalquenos de ácidos grasos reacción de Michael

Areas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Computacional, Bioquímica

Este trabajo se enmarca en pasantías de iniciación a la investigación desarrolladas en el marco de actividades electivas de la Licenciatura en Bioquímica que concluye en la presentación del trabajo en formato poster en las Jornadas de la Sociedad Uruguaya de Biociencias a sostenerse en setiembre 2014. Se contó con la co-orientación del Lic. Jenner Bonanata.

Nitrolípidos como posibles fármacos para tratamiento de IBDs por medio de la interacción con PPARgamma (INI-X_2011_1_3918) (2013)

Iniciación a la investigación

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

Nombre del orientado: María Victoria Veroli

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Web: http://www.anii.org.uy/web/static/Informe_cierre_convocatoria_BE_ININ_1_2011.pdf

Palabras Clave: Nitrolípidos (oleico, linoleico, araquidónico) Receptor PPARgamma, interacciones

modelado computacional QM, QM/MM

Áreas de conocimiento:

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

Caracterización in silico del mecanismo de la reducción de compuestos de Pt(IV) por tioles biológicos (2013)

Otras tutorías/orientaciones

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

Nombre del orientado: Ignacio Mastandrea

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Anticancerígenos de Pt(IV) Reducción Pt(IV) a Pt(II) por tioles biológicos DFT-PCM ONIOM QM:QM

Áreas de conocimiento:

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

Pasantía por llamado abierto a aspirantes para aproximarse a los temas de investigación en Química Teórica y Computacional. Estudiante de 3er año de la Licenciatura en Bioquímica 6 meses de duración (marzo-setiembre 2013), 10 hs/sem. mínimas

Modelado ONIOM de la selectividad en reacciones catalizadas de Candida Antactica Lipase B (2013)

Otras tutorías/orientaciones

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

Nombre del orientado: Sergio Ruschi Bergamachi Silva

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Candida Antartica Lipase B ONIOM QM:MM

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de enzimas y su mecanismo

Se orientó en abril 2013 al Lic. Sérgio Ruschi Bergamachi Silva, estudiante de Maestría en Química del Grupo de Modelagem Molecular e Simulação Aplicados - MMSA - UFRN, Brasil, bajo la orientación del Dr. Caio Lima Firme. La pasantía consistió en su entrenamiento en técnicas ONIOM QM/MM aplicadas al modelado de procesos en enzimas y su aplicación a la elucidación de la selectividad de los procesos catalizados por la Lipasa B de Cándida Antactica.

Caracterización de derivados nitrados de ácidos grasos insaturados con métodos de modelado computacional (2012)

Otras tutorías/orientaciones

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

Nombre del orientado: Victoria Veroli

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: nitrolípidos ácido araquidónico modelado de la reactividad y reconocimiento DFT/PCM

Áreas de conocimiento:

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

Pasantía honoraria de iniciación a la investigación en el LQTC, Facultad de Ciencias, UdeLaR. Este trabajo se enmarca en cooperación iniciada en marzo 2010 con el grupo del Prof. Homero Rubbo en Facultad de Medicina

Estudio del mecanismo de reacción y el origen del poder catalítico de la peroxirredoxina V abordado desde un enfoque teórico-experimental-(INI_X_2010_2_2839)-2011-2012 (2012)

Iniciación a la investigación

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

Nombre del orientado: Stephanie Portillo

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Modelado computacional Peroxirredoxina V Formación de ácido sulfénico

Áreas de conocimiento:

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática / Bioinformática estructural de Proteínas
En co-tutoría con el Dr. Gerardo Ferrer-Sueta (Lab. de Físicoquímica Biológica, Facultad de Ciencias) quien orienta la componente experimental de los estudios.

Caracterización de la reactividad de residuos blanco de la glicación en variantes de péptido beta-amiloide (2012)

Otras tutorías/orientaciones
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR, Uruguay
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Lic. Lucía Minini
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Glicación beta amiloide Alzheimer modelado QM/MM ONIOM
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional
Trabajo de investigación iniciado en el marco de Ayudantía en Química Teórica y Computacional entre diciembre 2011-junio 2012; fue retomado en marzo 2015 como línea de investigación en cercanía a la que desarrolla en su tesis de posgrado en el LQTC, con algún avance limitado. Se trabajó con la Lic. Minini entre 2012 y 2014 en simulaciones de la estructura y dinámica de complejos del receptor nuclear SF-1 WT y con variantes asociadas a patologías, que ha dado lugar a una publicación científica arbitrada en revista internacional en 2015 y entre 2014 y 2015 en estudios de interacciones de compuestos de coordinación con ADN, que se están extendiendo al presente a otros compuestos.

Estudio mediante métodos mixtos QM/MM (ONIOM) de la abstracción de hidrógeno de la etanolamina por el radical adenosilo en el sitio activo de la etanolamina amonio liasa (contrato BE_INI_2010_1752) (2011)

Iniciación a la investigación
Sector Educación Superior/Público / / , Uruguay
Nombre del orientado: Lic. Jenner Bonanata
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Radicales metabolismo patógenos entéricos modelado DFT-PCM
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Biológica -Química Teórica y Computacional
Ciencias Médicas y de la Salud / Medicina Básica / Bioquímica y Biología Molecular
Beca de iniciación a la Investigación ANII 2010- 2011 Inicio 01/07/2010-Cerrada exitosamente al 15/07/2011

Exploración de compuestos de Pt(IV) con potencial acción anticancerígena. (2010)

Otras tutorías/orientaciones
Sector Educación Superior/Público / / , Uruguay
Nombre del orientado: Stephanie Portillo; Alvaro Pittini
Medio de divulgación: Papel
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Anticancerígenos de Pt(IV) Iniciativas estudiantiles
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Físicoquímica Teórica y Computacional aplicada a Sistemas Biológicos
Programa de Apoyo a la Realización de Proyectos de Investigación para Estudiantes Universitarios Llamado 2010. Proyecto presentado para aspirar a financiamiento el 30/06/2010. No fue financiado pero el trabajo se ha continuado desarrollando con menor dedicación de los implicados (Pittini hasta marzo 2011 y Portillo hasta junio 2011, trabajando al presente en la escritura de un primer borrador completo de manuscrito para publicación).

Modelado de la estructura y reactividad de aniones radicales de compuestos biocativos de Pt/Pd con tiosemicarbazonas (2010)

Otras tutorías/orientaciones
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR, Uruguay
Nombre del orientado: Lucía Minini
País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: DFT/PCM nitro-aniones radicales Funciones e índices de Fukui compuestos de Pt/pd con tiosemicarbazonas

Áreas de conocimiento:

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

Trabajo de iniciación a la investigación co-dirigido con la Dra. Alicia Merlino en el LQTC, bajo contrato de Ayudante de la Bach. Minini entre agosto y diciembre 2010 y en forma honoraria en 2011, sin haberse dado por concluido, está en estos momentos en suspenso.

Modelado de la estructura y propiedades de compuestos de Pt(IV). (2009)

Otras tutorías/orientaciones

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

Nombre del orientado: Alvaro Pittini

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Efecto de la solvatación DFT - PCM Anticancerígenos de Pt(IV) y Pt(II) Data Mining (HCA y PCA)

Áreas de conocimiento:

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

Pasantía honoraria de iniciación a la investigación (1er semestre 2009 y 2010) y Ayudantías en el LQTC (2do semestre 2009 y 2010) La labor desarrollada dio lugar en noviembre 2009 a una presentación oral seleccionada en las 6tas Jornadas de la SBBM a cargo del estudiante y en 2010 a una comunicación formato poster en un congreso internacional en España a cargo de su tutora. El Bach. Pittini dejó de trabajar activamente en esta línea en marzo 2011, cuando asumió un contrato full-time en el grupo de Inmunología, en una etapa previa a la elaboración del artículo correspondiente, labor que quedó pendiente).

Ayudantía en Química Teórica - inicio a la investigación -2008-2009 (2009)

Otras tutorías/orientaciones

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

Nombre del orientado: Leticia Couto

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Acuación de Picoplatino DFT B3LYP PCM Mecanismos de reacción

Áreas de conocimiento:

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

Ingreso al cargo de Ayudante 20 hs/sem. por un año, como estudiante de grado avanzada. Se tutoró el trabajo hasta la presentación en las jornadas de la SBBM de 2009 de una comunicación formato poster.

Pasante y Ayudante Gr.1, 20 hs del LQTC/2004-2008-Varios temas, ver información adicional (2008)

Otras tutorías/orientaciones

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

Nombre del orientado: Matías Machado

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: EAL/B12 protonación total/parcial Continuum Models

Áreas de conocimiento:

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

Trabajó inicialmente como pasante de iniciación, hasta obtener un contrato como Ayudante del LQTC por un semestre en 2004 y luego por concurso de méritos y pruebas de 2005-2008. Trabajó inicialmente en el modelado del efecto del medio sobre el mecanismo, energética y cinética de la etapa de migración 1,2 de NH₃ en el sustrato de la enzima Etanolamina Amonio Liasa. En segunda instancia se acopló al trabajo de un proyecto I+D de mi autoría, trabajando con simulaciones de dinámica molecular del complejo [Ru(II)(bpy)₂dppz]²⁺ y sus interacciones con ADN. Desarrolló una herramienta para el procesamiento en batch de estructuras de ADN con el programa CURVES. Al graduarse pasó a desarrollar su Tesis de Maestría en el Instituto Pasteur de Montevideo.

Ayudante investigación CSIC I+D y LQTC/2005-2008/Switches moleculares de luz de [Ru(II)(dppz)L₂]²⁺ e interacción con ADN (2007)

Otras tutorías/orientaciones

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

Uruguay

Nombre del orientado: Leonardo Darré

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Molecular Light Switches DNA interactions TD-DFT PCM Dinámica Molecular

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Ayudantía bajo contrato en proyecto CSIC I+D de mi autoría. Trabajó entre 2005 y 2007 en este contexto, y luego continuó por el bienio 2007-2008 trabajando en los mismos temas bajo mi orientación, hasta el momento de su graduación e inicio de una Tesis de Maestría en el Instituto Pasteur, cortando en ese momento todo vínculo con nuestro equipo.

Ayudante investigación proyecto CSIC I+D/2005-2007 - Simulaciones ADN condiciones fisiológicas (2005)

Otras tutorías/orientaciones

Sector Educación Superior/Público / / , Uruguay

Nombre del orientado: Gustavo Mourglia

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Simulaciones de dinámica molecular Dodecámeros de ADN duplex Análisis estructural

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Orientación del trabajo como Ayudante de Investigación (no graduado) en proyecto de mi autoría.

Tema de trabajo: Modelado de plantillas de ADN en condiciones fisiológicas

Pasantía y Ayudantía de investigación proyecto CSIC I+D/2003-2005/Estructura y espectroscopía de complejos [Ru(II)(dppz)L2]2+ (2005)

Otras tutorías/orientaciones

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

Nombre del orientado: Alicia Merlino

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: switches moleculares de luz [Ru(II)(dppz)L2]2+ Modelado estructura y UV-Vis DFT - PCM - TDDFT

Áreas de conocimiento:

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

Computación / Química Teórica y Computacional

La estudiante comenzó a hacer sus primeras experiencias de investigación en 2003, luego de cursar Qca. Computacional bajo orientación de quien escribe. Trabajó parte de 2004 y fue contratada por proyectos entre fin de 2004 y 2005. Dejó el trabajo para dedicarse a Qca. Orgánica, donde realizó su tesina de graduación y tesis doctoral, reincorporándose a nuestro Laboratorio y a la misma línea de investigación en 2009, ya como Prof. Adjunta.

Modelado de los productos de daño oxidativo sobre bases guanina y su efecto sobre la estructura y estabilidad de cadenas cortas de ADN (2003)

Iniciación a la investigación

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

Nombre del orientado: Alexandra Castro

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Nucleobases, dímeros y hebras simples de ADN Modelado computacional Daño oxidativo

Áreas de conocimiento:

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

Computación / Química Teórica y Computacional

Proyecto de iniciación a la investigación aprobado y financiado en convocatoria de CSIC, bajo tutoría de quien escribe. La estudiante de grado de Lic. en Bioquímica, continuó a través de este proyecto la temática iniciada en su tesina de graduación. Se desarrolló entre 2002 y 2003

Beuario Investigación CSIC-I+D y Ayudante del LQTC/1995-1999/Modelado de complejos catión radical con aceptores/dadores de H (1999)

Otras tutorías/orientaciones

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

Nombre del orientado: Leonardo Lucchini

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Estructura y reactividad MP2 - DFT B3LYP Cationes radicales distónicos

Áreas de conocimiento:

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

Comenzó a trabajar como estudiante no graduado de Ingeniería Química contratado entre 1995 y 1997 como becario de investigación por proyecto, tomando sus primeros cursos en Química Computacional en paralelo. Trabajó con métodos MP2 y B3LYP en la caracterización de complejos débiles de cationes radicales del alcohol vinílico. Desarrolló en el contexto de su contrato del proyecto una pasantía en la Universidad de Girona, España, para entrenarse en el empleo de herramientas para establecer semejanza molecular. Continuó trabajando en investigación en este tema entre 1997-1999 ya en el contexto de un contrato como Ayudante del LQTC.

Undergraduate Research Internship - Code development for geometry optimizations using IMOMO (1997)

Iniciación a la investigación

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Minnesota Supercomputer Institute, University of Minnesota, Estados Unidos , Estados Unidos

Nombre del orientado: Darrel Hurt

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Estados Unidos, Inglés

Palabras Clave: Integrated MO-MO strategy Geometry optimization Code Programming

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Computación / Química Teórica y Computacional

Igual que en los dos casos anteriores

MSI Undergraduate Research Internship - Testing IMOMO with semiempirical and DFT methods. (1996)

Iniciación a la investigación

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Minnesota Supercomputer Institute, University of Minnesota, Estados Unidos , Estados Unidos

Nombre del orientado: Molli Noland

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Estados Unidos, Inglés

Palabras Clave: IMOMO Testing performances

Áreas de conocimiento:

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

Estudiante no graduada de la Universidad de Minnesota (major in Computational Sciences) en pasantía de verano de iniciación a la investigación en el grupo del Prof. Donald G. Truhlar, con quien me desempeñaba como postdoctoral fellow y se me asignó el seguimiento por un trimestre de esta estudiante de verano.

MSI Undergraduate Research Internship - Developing a new input format for Direct Dynamics Calculations (1996)

Iniciación a la investigación

Sector Extranjero/Internacional/Otros / Minnesota Supercomputer Institute, University of Minnesota, Estados Unidos , Estados Unidos

Nombre del orientado: Steve Clayton

Medio de divulgación: Papel

País/Idioma: Estados Unidos, Inglés

Palabras Clave: Direct Dynamics input format programng

Áreas de conocimiento:

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

Summer Undergraduate Research Internship en el grupo del Prof. D. G. Truhlar. La orientación de la pasantía fue asignada a quien escribe en el carácter de MSI postdoctoral fellow en la UofM

TUTORÍAS EN MARCHA

POSGRADO

Caracterización bio-estructural de inhibidores de catepsinas de fasciola hepática como potenciales fármacos antihelmínticos (2018)

Tesis de maestría

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR / Laboratorio de Química Teórica y Computacional, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias , Uruguay

Tipo de orientación: Asesor/Orientador

Nombre del orientado: Lic. Florencia Ferraro

Medio de divulgación: Otros

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Modelado DFT/PCM de compuestos híbridos de flavonoides-chalconas/quinoxalinas Simulaciones de dinámica molecular con catepsinas Diseño racional de antihelmínticos Inhibición de catepsinas de fasciola hepática

Áreas de conocimiento:

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

Los estudios forman parte de la tesis de Maestría en Química de la Lic. Ferraro iniciados en 2015 bajo la Dirección Académica y de tesis del Dr. Mauricio Cabrera (Prof. Adjunto PDU Paysandú, CENUR Litoral Norte) y co-dirección de tesis de las Dras. Ileana Corvo (Asistente PDU Paysandú, CENUR Litoral Norte) y Alicia Merlino (Prof. Adjunta LQTC-FCIEN). Tras el fallecimiento de la Dra. Merlino el 08/07/18, se definió acompañar en el LQTC la supervisión del tramo final de estudios computacionales que integran el trabajo de esta tesis y el proceso de elaboración del documento de tesis, que se prevé remitir a la Comisión de Posgrado de la Facultad de Química a inicios de 2019.

Estudio comparativo de hidroxilamido- y peroxo-compuestos de vanadio(V) desde un abordaje teórico - experimental (2015)

Tesis de doctorado

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

Programa: Doctorado en Química

Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad

Nombre del orientado: M.Sc. Q.F. Gabriel Arrambide

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: compuestos de V(V) bioactivos y miméticos de VPHO Capacidad antitumoral Catálisis de bromación

Áreas de conocimiento:

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Inorgánica Medicinal

Co-tutora con la Dra. Dinorah Gambino (Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química). El trabajo se desarrolla en Facultad de Química (parte experimental) y Facultad de Ciencias (labor de modelado computacional). Fecha oficial de inicio 18/06/2015

GRADO

Modelado de complejos de ácidos grasos y derivados nitrados con el receptor nuclear PPAR γ ; Modelado del mecanismo de Fumarato Reductasas de *T. cruzi* y *L. major* (2018)

Docente adscriptor/Practicantado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR / Laboratorio de Química Teórica y Computacional, Instituto de Química Biológica , Uruguay

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Lic . Santiago Sastre

País/Idioma: Uruguay, Español

Áreas de conocimiento:

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

Labor de investigación encuadrada bajo mi única orientación en el cargo de Ayudante Gr.1 efectivo de la unidad que dirijo, tras ingreso del Lic. Sastre por concurso de méritos y pruebas.

Modelado DFT/PCM de la estructura y termoquímica de compuestos de azufre (2018)

Docente adscriptor/Practicantado

Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR / Laboratorio de Química Teórica y Computacional , Uruguay

Tipo de orientación: Tutor único o principal

Nombre del orientado: Bach . Paula Segovia

País/Idioma: Uruguay, Español

Palabras Clave: Compuestos de azufre Termoquímica Computacional Diagrama de Frost DFT/PCM

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional; Química Cuántica
Orientación del inicio a la investigación en el marco de Ayudantía interina por concurso de méritos. Inicio en Julio 2018. El trabajo se encuadra en una cooperación en curso desarrollada por quien escribe con el Prof. Emérito del EHTZ de Zurich, Dr. Whillem H. Koppenol, desde abril 2017.

Fisicoquímica Moderna; Termoquímica y Cinética Computacional; Predicción y análisis in silico de estructura de proteínas (2016)

Docente adscriptor/Practicantado
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR , Uruguay
Tipo de orientación: Tutor único o principal
Nombre del orientado: Lic. Jenner Bonanata
País/Idioma: Uruguay, Español
Palabras Clave: Fisicoquímica Moderna
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de estructura y propiedades de moléculas y macromoléculas
Supervisión de la preparación del Lic. Bonanata (ingreso a la carrera docente en mayo 2016) para la enseñanza de grado y posgrado

Otros datos relevantes

PREMIOS, HONORES Y TÍTULOS

Reconocimiento de poseer méritos para ocupar un cargo de Profesor Titular (Gr.5) en Facultad de Ciencias, Udelar (2018)

(Nacional)
Facultad de Ciencias, Udelar
Reconocimiento en el sistema de carrera docente de la Udelar de poseer méritos para ocupar una posición de Profesor Titular de Química Teórica y Computacional desde 2006 y haber acrecentado desde entonces los méritos, A la espera de la creación de la oportunidad de concursar por el ascenso.

Journal Molecular Modeling (Springer)- Editora asociada por invitación (2016)

(Internacional)
Journal Molecular Modeling

Investigador Honorario Gr. 4 (Primer Nivel) PEDECIBA-Química (2015)

(Nacional)
PEDECIBA-Química

Investigador Activo del SNI (2009)

(Nacional)
ANII
Ingreso a la categoría activa, Nivel I (se deja constancia de no haber logrado ingresar toda la información de méritos previos, actualmente presente en la ficha para esa primer evaluación). Solicité en la primer re-evaluación ser considerada para la categoría de nivel II en función de mi historial completo de méritos. En 2013 por motivos de salud no pude presentar el formulario para re-evaluación. Solicito el reingreso en el llamado de 2014, acabo de ser reincorporada al Sistema. He presentado el pedido de reconsideración a la categorización realizada en esta última instancia, visto que se omitieron en la evaluación muchas de mis contribuciones y otras no fueron reflejadas cabalmente.

Evaluada con méritos suficientes para ocupar un cargo de Profesor Titular, Gr.5 (2006)

(Nacional)
Facultad de Ciencias - UDELAR
Realizado un llamado a aspiraciones para ocupar 2 cargos de Profesor Titular entre las áreas Biología, Centro de Investigaciones Nucleares y Química Biológica de Facultad de Ciencias de la Universidad de la República, la Comisión Asesora (integrada por Ricardo Ehrlich, Enrique Lessa,

Omar Macadar, Patrick Moyna y Eduardo Osinaga) me declaró poseedora de méritos suficientes para ocupar una de esas plazas.

Mejor trabajo de sesión en el Simposio de Biología Molecular y Bioquímica (2004)

(Nacional)

Sociedad Uruguaya de Biociencias - Sociedad de Biología Molecular y Bioquímica
Mejor trabajo de sesión (con evaluación internacional) en las Jornadas de la Sociedad de Biología Molecular y Bioquímica (SBBM).

Premio TWAS-CONICYT al mejor joven investigador del país, área Química (1999)

(Nacional)

TWAS-CONICYT

Premio otorgado por el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y técnicas (CONICYT-MEC) y la Academia del Tercer Mundo (TWAS) al mejor joven científico (hasta 35 años) del país en el área Química.

Minnesota Supercomputer Institute International Research Scholar (1995)

(Internacional)

Minnesota Supercomputer Institute, Univ. Minnesota

Concurso internacional que otorgara grants en base al currículo de los investigadores y el proyecto de trabajo presentado. En mi caso el proyecto fue presentado para trabajar junto al Prof. Donald G. Truhlar en el Instituto de Tecnología de la Universidad de Minnesota, Campus de Twin Cities, Minneapolis, donde estuve trabajando a nivel post-doctoral entre 1995 y 1997.

Investigador Honorario Grado 5 (Primer Nivel) -PEDECIBA-Química-1994-2005 (1994)

(Nacional)

PEDECIBA-Química

Fui designada Investigador Gr.5 del área Química del PEDECIBA en 1994, siendo renovada en tal posición en todas las convocatorias desarrolladas durante la década sucesiva. A comienzos de 2005 estando ya desde hacía varios meses con un fuerte quebranto de salud, al no poder presentar mi currículum en el formato CVLattes introducido ese año (algo que fue comunicado a la Comisión del Área) fui desvinculada de inmediato del Programa. Ante esa situación, no volví a presentarme para ingresar al mismo en los 7 años posteriores.

Premio Folia Chimica Theoretica Latina (cuarta edición) - Mejor trabajo de actualización publicado en el bienio (1992)

(Internacional)

Folia Chimica Theoretica Latina

Premio otorgado al mejor trabajo de revisión publicado en la revista en el bienio. La Folia Chimica Theoretica Latina era el órgano oficial de la Sociedad de Químicos Teóricos de Expresión Latina, de carácter internacional.

Investigador Honorario Grado 3 PEDECIBA Química-1991-1994 (1991)

(Nacional)

PEDECIBA-Área Química

Ingresé como Investigador Honorario Gr.3 del área Química apenas completé mis estudios de Maestría. En la siguiente convocatoria para re-evaluación presente mis méritos y fui ubicada en la posición de Investigador Honorario GR.5.

PRESENTACIONES EN EVENTOS

IV Seminario Internacional de intercambio de experiencias e investigación sobre egreso universitario: políticas educativas, seguimiento de graduados y articulaciones con el mundo del trabajo. (2018)

Seminario

Comunicación: "Realidades, mitos y opiniones sobre los perfiles de egreso y la inserción de los graduados de la Licenciatura en Bioquímica de la Udelar, período 1994-2012"

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 16

Nombre de la institución promotora: Universidad de la República (Área de Tecnologías y Ciencias de la Naturaleza, Facultades de Veterinaria y Agronomía, Comisión Sectorial de Enseñanza)

Palabras Clave: Seguimiento graduados Licenciatura en Bioquímica Trayectorias curriculares

Estudio realizado en co-autoría con la Mag. Carolina Cabrera Di Píramo.

QUITEL 2018 - 44° Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2018)

Congreso

Unveiling the Intimate Nature of the Interaction of Oleic, Linoleic and Conjugated Linoleic Unsaturated Fatty Acids Nitroalkenes with Physiologically Relevant Proteins

Chile

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 30

Nombre de la institución promotora: Pontificia Universidad Católica de Chile

Palabras Clave: Interacción nitrolípido-proteína aductos de Michael Modelado computacional

Areas de conocimiento:

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

No corresponde

Gordon Research Conference in Computational Chemistry (2018)

Congreso

Expositor de poster ""Nitro-Fatty Acids: Interaction with Physiologically Relevant Proteins. Targets for Thiol-Michael Addition in FABP4 and PPARg?" by E.L. Coitiño, J. Bonanata, A. Merlino, A. Cantou, S. Portillo and S. Sastre.

Estados Unidos

Tipo de participación: Poster

Nombre de la institución promotora: Gordon Research Conferences Organization

Palabras Clave: Química Computacional Modelado de interacciones reactivas y no reactivas de ácidos grasos insaturados y sus derivados nitrados con tioles de bajo peso molecular y proteínas (FABP4)

Areas de conocimiento:

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

WATOC 2017 - 11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical & Computational Chemists (2017)

Congreso

WATOC 2017-11th Triennial Congress of the World Association of Theoretical & Computational Chemists -Invited speaker

Alemania

Tipo de participación: Conferencista invitado

Carga horaria: 50

Nombre de la institución promotora: World Association of Theoretical & Computational Chemists & Ludwig-Maximilians-Universität (LMU)

Palabras Clave: Theoretical & computational Chemistry

Areas de conocimiento:

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

Conferencia invitada titulada: "Sulfenic acid or sulfenate? A matter of protein environment and water access in oxidized Cysteine sites of physiological relevance"

Quinto Encuentro Nacional de Química ENAQUI 5 (2017)

Congreso

ENAQUI 5-Quinto Encuentro Nacional de Química - Integrante Comité Científico - Evaluadora posters, Co-autora de dos posters

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 16

Nombre de la institución promotora: PEDECIBA - Química

Palabras Clave: Compuestos de Ru tipo piano Stool hidrosolubles actividad antiproliferativa Compuestos de Vanadio

Areas de conocimiento:

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

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Química Inorgánica y Nuclear / Química Inorgánica Medicinal

II Jornadas de Enseñanza de la Biología a Nivel Terciario (2017)

Encuentro

II Jornadas de Enseñanza de la Biología a Nivel Terciario - CFE-ANEP- Expositora oral

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 8

Nombre de la institución promotora: Consejo de Formación en Educación, ANEP

Palabras Clave: Alzheimer Diabetes Enseñanza Superior Proteínas en salud y enfermedad Fiebre del Dengue Cooperación ANEP-UDELAR

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Bioquímica y Biología Molecular / Estructura de proteínas clave en patologías humanas

Trabajo expuesto: "Proteínas de la vida, en salud y enfermedad: una plataforma para enseñar en la educación superior reflexionando sobre la construcción del conocimiento científico." Se presentó la plataforma y dos casos de aplicación desarrollados en 2017: a) estudiantes de 4to año de Profesorado en Cs. Biológicas de IPA-CFE-ANEP en pasantía de acercamiento a la investigación científica en LQTC-FC-UDELAR (mayo-octubre 2017) trabajando con quien escribe sobre estructura e interacciones de proteínas implicadas en Alzheimer (beta-amiloide) y Fiebre del Dengue (proteínas de envoltura del virus y papel en fusión de membranas). b) estudiantes de 4to año de Lic. en Cs. Biológicas de FCIEN-UDELAR en EFI Plataforma de Enseñanza de las Ciencias en Malvín Norte, trabajando en junio-octubre 2017 con quien escribe en el diseño y sostén de 12 hs de talleres con Maestra y escolares de 5to año de la Escuela N°268.

CHITEL 2017 - 43rd Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (2017)

Congreso

CHITEL 2017 -43° Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina: Expositora oral, panelista e integrante Comité Científico internacional

Francia

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 30

Nombre de la institución promotora: Ecole Normale Supérieure de Paris (ENSP) - CNRS- Sorbonne Universités

Palabras Clave: Química Teórica y Computacional

Áreas de conocimiento:

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

Congreso Nacional de Biociencias (2017)

Congreso

Congreso nacional de Biociencias - Co-autora expo. oral+poster, evaluadora posters, organización por SBF.uy

Uruguay

Tipo de participación: Otros

Carga horaria: 24

Nombre de la institución promotora: Sociedad Uruguaya de Biociencias y seccionales/sociedades amigas

Áreas de conocimiento:

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

56th Sanibel Symposium (2016)

Congreso

56th Sanibel Symposium - expositor oral 1 trabajo y expositor 1 poster

Estados Unidos

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 48

Nombre de la institución promotora: Quantum Theory Project (QTP), University of Florida

Palabras Clave: Modulación de la reactividad por el entorno oxidación de tioles por H₂O₂ MD y QM/MM de reacciones en proteínas MD+QM/MM reconoc. lactoalbúmina-ác.grasos

HAMLET:lactoalbúmina-oleato

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional de proteínas, QM/MM, dinámica molecular

Conferencista oral seleccionada con el trabajo "Modulating the Reactivity of Biological Thiols and the Mechanism of Reaction with H₂O₂ by Hydrogen Bonding in Their Local Environments" y expositora del poster "Poster-Modeling the Interaction of Oleic Acid with two α -Lactalbumin Folding Variants: in Route towards Deciphering the Molecular Basis of HAMLET's Antitumoral Activity"

Quitel2016 (2016)

Congreso
QUITEL 2016- 42mo Congreso Internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Co-chair,
expositora oral, coautora 2 orales y 3 posters
Uruguay
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40
Nombre de la institución promotora: UdelaR-IPMON
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado computacional de estructura y propiedades de moléculas y
macromoléculas

III CCES Workshop & SAIMS (South American Initiative on Molecular Simulations) (2016)

Taller
III CCES Workshop & SAIMS (South American Initiative on Molecular Simulations), Campinas,
Brasil - conferencista invitado
Brasil
Tipo de participación: Conferencista invitado
Carga horaria: 48
Nombre de la institución promotora: Center for Computational Engineering & Sciences -
Universidad de Campinas
Palabras Clave: Mecanismos de reacción Biofísica computacional de proteínas Enzimología
Computacional Modulación de reactividad por el entorno proteico puntos de inflexión cresta-valle
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Modelado computacional de proteínas, QM/MM, dinámica molecular
Presentación: "MD simulations + QM/MM modeling used for understanding chemical reactivity
and reaction mechanisms tuned by local environments (w/water and Hydrogen-Bonding as central
protonists)" E.L. Coitiño, 9th May 2016, Campinas

Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology (2015)

Congreso
Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology - Organizadora, Chair de sesión, co-autora
de 4 posters y una oral, expositora de 1, evaluadora de posters
Uruguay
Tipo de participación: Moderador
Carga horaria: 40
Nombre de la institución promotora: SBF.uy (Seccional Biofísica Uruguay) y SAB (Sociedad
Argentina de Biofísica)
Palabras Clave: Computational Biophysics
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica Computacional
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros,
Electroquímica / Bioquímica Computacional, Química Teórica y Computacional
Trabajé desde 2014 en la organización de este evento, desarrollado en el Complejo de la Comisión
Técnico-Mixta de Salto Grande del 26-29 de noviembre de 2015. Fui chair de simposio
(Computational Biophysics) y expositora de un poster y co-autora de otros 3, además de coautora
de una exposición oral a cargo de una de mis estudiantes de doctorado.

2nd International Symposium "Thiol metabolism and Redox Regulation of Cellular functions" (2015)

Simposio
2nd International Symposium "Thiol metabolism and Redox Regulation of Cellular functions" - 3
posters, expositora de 1
Uruguay
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 16
Nombre de la institución promotora: ICGEB -IPMON - UDELAR

Watoc 2014 - Third Triennial congress of the World Association of Theoretical Chemists (2014)

Congreso
WATOC 2014- Congreso Mundial de Químicos Teóricos, Chile - expositora oral seleccionada-
expositora de 1 poster - coautora de 1 oral y 4 posters más
Chile
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: WATOC

Palabras Clave: Química Teórica

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Química Teórica y Computacional

Mini-Simposio: Modelización computacional de sistemas complejos de interés biológico y biomédico (2014)

Simposio

Mini-Simposio: Modelización computacional de sistemas complejos de interés biológico y biomédico - Expositora oral

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 4

Nombre de la institución promotora: CENUR Litoral Noroeste (Regional Norte), Salto, UdelaR

Palabras Clave: Química Computacional Modelado de biomoléculas Interacciones reactivas y no reactivas

Áreas de conocimiento:

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

Electroquímica / Modelado computacional de compuestos bioactivos

XVIII Internat. Workshop Quantum systems in Chemistry, Physics & Biology (2013)

Congreso

XVIII Internat. Workshop Quantum systems in Chemistry, Physics & Biology, Paraty, Brasil - expositora 1 poster y 2 short presentations, coautora 1 poster

Brasil

Tipo de participación: Otros

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Universidad de Rio de Janeiro

International Symposium on Organic Reaction Mechanism---A celebration in honor of Bob Grubbs, Ken Houk, Paul Schleyer and Don Truhlar (2013)

Simposio

International Symposium on Organic Reaction Mechanism, Shenzhen, China - Expositora oral invitada

China

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 16

Nombre de la institución promotora: Peking University, Graduate School of Shenzhen

2das Jornadas +Biofísica -2013 (2013)

Congreso

2das Jornadas +Biofísica - congreso nacional de la seccional SBF.uy - Chair, evaluadora posters, coautora 6 posters y 1 oral

Uruguay

Tipo de participación: Comentarista

Carga horaria: 24

Nombre de la institución promotora: SBF.uy

Chair de sesión de Simulaciones y Modelización de Biomoléculas Evaluadora de trabajos de estudiantes

Quitel 2012, Congreso internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2012)

Congreso

Quitel 2012, Congreso internacional de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Natal Brasil - expositora oral seleccionada + expositora 2 posters, evaluadora posters

Brasil

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: Universidad Federal de Río Grande del Norte

Conferencia Interdisciplinaria 2012 Computación Científica de Alto Desempeño (2012)

Simposio

Conferencia interdisciplinaria: Computación Científica de Alto Desempeño - PEDECIBA - FING - UdelaR

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 8

Nombre de la institución promotora: PEDECIBA y NICCAD-UDELAR

Áreas de conocimiento:

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

Winter Modelling 2011 (2011)

Congreso

Winter Modelling 2011 - SNS, Pisa, Italia -Expositora oral invitada

Italia

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 24

Nombre de la institución promotora: Scuola Normale Superiore, Pisa

Palabras Clave: Reactividad purinas ADN modulada por entorno Compuestos bioactivos de Pt/Pd/Ru

Áreas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Modelado computacional sistemas interés biológico, QM/MM, dinámica molecular

1st Symposium Thiol Metabolism and redox regulation of Cellular Functions (2011)

Simposio

1st Symposium Thiol Metabolism and redox regulation of Cellular Functions - Expositora 1 poster

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 24

Nombre de la institución promotora: UDELAR - IPMON -ICGEB

5th TheoBio - Theoretical Biophysics International Symposium (2011)

Simposio

5th TheoBio - Theoretical Biophysics International Symposium 2011, Madeira, Portugal -

Expositora poster

Portugal

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

QBIC 3 - Quantum Bioinorganic Chemistry 3 (2011)

Congreso

QBIC 3 - Quantum Bioinorganic Chemistry 3, Czesky Krumlov, Rep. Checa - Expositora 1 poster

República Checa

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 30

X Jornadas de Investigación de la Facultad de Cs. Sociales (2011)

Congreso

X Jornadas de Investigación de la Facultad de Cs. Sociales, Montevideo, 2011 - Expositora 1

poencia oral

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 6

7mas Jornadas de la SBBM (2011)

Congreso

7mas Jornadas de la SBBM, Montevideo - expositora de 1 poster, coautora de otros

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 20

Nombre de la institución promotora: SUB - SBBM

4th International Conference on Concept Mapping (2010)

Congreso

4th International Conference on Concept Mapping, Viña del Mar, Chile - Expositora de un poster
Chile

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 24

Jornadas Regionales sobre la formación en docencia universitaria (2010)

Congreso

Jornadas Regionales sobre la formación en docencia universitaria, FHCE-UdelaR, 2010 -

Expositora oral

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 16

Nombre de la institución promotora: FHCE-UDELAR

IV Foro de Innovaciones en Educación Superior (2010)

Congreso

IV Foro de Innovaciones en Educación Superior. FCEE, 2010 - Expositora 2 orales

Uruguay

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 20

Nombre de la institución promotora: UDELAR

7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA) (2010)

Congreso

7th Congress on Electronic Structure: Principles and Applications (ESPA), Oviedo, España -

Expositora poster

España

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

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

Congreso

IX Girona Seminar Electron Density, Density Matrices, and Density Functional Theory, Girona,

España- Expositora 1 poster

España

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

XXXIV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2008)

Congreso

XXXIV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Cetraro, Italia - Expositora oral

plenaria

Italia

Tipo de participación: Conferencista invitado

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

Latina

XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 07) (2007)

Congreso

XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (QUITEL 07), La Habana, Cuba -

Expositora oral seleccionada - Expositora 1 poster

Cuba

Tipo de participación: Expositor oral

Carga horaria: 40

6th Int. conference of Biological Physics, 5th Southern Cone Biophysics Congress (2007)

Congreso

6th Int. conference of Biological Physics, 5th Southern Cone Biophysics Congress, Montevideo -

Expositora poster, coautora 2 posters

Uruguay

Tipo de participación: Poster

Carga horaria: 40

Nombre de la institución promotora: IUPAB

Conference on Drug Development for the Third World (2006)

Congreso
Conference on Drug Development for the Third World, ICTP, Trieste, Italia - Expositora 2 posters, coautora 1 poster
Italia
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40
Nombre de la institución promotora: ICTP

Workshop (2006)

Simposio
Eight Giambiagi Winter School Part B & Workshop - Expositora Oral - Sistemas Complejos en Físicoquímica Moderna
Argentina
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40

Perspectivas para el desarrollo de la Bioinformática en el Uruguay (2005)

Simposio
Perspectivas para el desarrollo de la Bioinformática en el Uruguay, LATU, 2006 - Expositora oral invitada
Uruguay
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 30
Nombre de la institución promotora: LATU

XVII Congreso Nacional e Internacional de Profesores de Química (2004)

Congreso
XVII Congreso Nacional e Internacional de Profesores de Química - Uruguay - Ponente invitada
Uruguay
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 24
Nombre de la institución promotora: Asociación de Educadores en Química - Uruguay
Palabras Clave: Enseñanza de la Química Estructura Molecular Visualización asistida por PC
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Teórica y Computacional

XXX Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2004)

Congreso
XXX Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Porto, Portugal - Expositora poster - coautora de 1 oral seleccionada y 1 poster
Portugal
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40

Sanibel Symposium 2002 (2002)

Congreso
Sanibel Symposium 2002, St. Augustine, FL, USA - Expositora 2 posters + sus respectivos 1 minute paper
Estados Unidos
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40
Nombre de la institución promotora: QTEP

XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (2002)

Congreso
XXVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Montevideo - Chair, organizadora, coautora 6 posters
Uruguay

Tipo de participación: Moderador
Carga horaria: 40

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

Congreso
XXVI Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Caxambu, Brasil - Expositora oral invitada - coautora 1 poster
Brasil
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40

Xth International Congress of Quantum Chemistry (2000)

Congreso
Xth International Congress of Quantum Chemistry, Menton, Francia - Expositora 2 posters
Francia
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40

Sanibel Symposium 1999 (1999)

Congreso
Sanibel Symposium 1999, St. Augustine, FL, USA - Expositora 1 posters + su 1 minute paper
Estados Unidos
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40

XXIV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (1998)

Congreso
XXIV Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Puebla, Mexico - Expositora oral + expositora 2 posters
México
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40

IAI & NASA Workshop "Understanding ozone and UV-B radiation. Past Accomplishments and Future Opprotunities" (1998)

Congreso
IAI & NASA Workshop "Understanding ozone and UV-B radiation. Past Accomplishments and Future Opprotunities" - Expositora 1 poster
Argentina
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 30
Nombre de la institución promotora: IAI & NASA

9th International Congress on Quantum Chemistry, (1997)

Congreso
9th International Congress on Quantum Chemistry, Atlanta, USA - Expositora de 3 posters
Estados Unidos
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40

XXXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (1996)

Congreso
XXIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Cáceres, España - Expositora 3 posters
España
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40

8th annual Conference on New Methods in Electronic Structure Calculations (1996)

Congreso
8th annual Conference on New Methods in Electronic Structure Calculations, Minneapolis, MN, USA - Expositora 1 poster

Estados Unidos
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 30

2nd Congress of the international Society for Theoretical Chemical Physics (1996)

Congreso
2nd Congress of the international Society for Theoretical Chemical Physics, New Orleans, USA -
Expositora oral + Expositora 1 poster
Estados Unidos
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40

XXII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (1995)

Congreso
XXII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Pucón, Chile - Expositora 1 poster
Chile
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40

1st European Conference on Computational Chemistry (1994)

Congreso
1st European Conference on Computational Chemistry, Nancy, Francia - Expositora 1 poster
Francia
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40

XXI Congres des Chimistes Theoriciens d'Expresión Latine (1993)

Congreso
XXI Congres des Chimistes Theoriciens d'Expresión Latine, Grenoble, Francia - Expositora 2
posters
Francia
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40

Xth International Workshop Horizons in Hydrogen Bond Research (1993)

Congreso
Xth International Workshop Horizons in Hydrogen Bond Research, Autrans, Francia - Expositora 2
posters
Francia
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40

1st Congress of the international Society for Theoretical Chemical Physics (1993)

Congreso
1st Congress of the international Society for Theoretical Chemical Physics, Girona, España -
Expositora oral + Expositora 1 poster
España
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40

Seminario Nazionale di Chimica Fisica - (1993)

Seminario
Seminario Nazionale di Chimica Fisica - Expositora oral
Italia
Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40

European Research Conference (1992)

Congreso
European Research Conference, San Feliu de Guixols, España
España

Tipo de participación: Expositor oral
Carga horaria: 40

XIX Congresso Internazionale dei Chimici Teorici d'Espressione Latine (1990)

Congreso
XIX Congresso Internazionale dei Chimici Teorici d'Espressione Latine, Roma, Italia - Expositora 2 posters
Italia
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40

5to Simposio Brasileiro de Quimica Teorica (SBQT), (1989)

Congreso
5to Simposio Brasileiro de Quimica Teorica (SBQT), Caxambu, Brasil - Expositora 3 posters
Brasil
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40

XVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina (1989)

Congreso
XVIII Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, La Plata, Argentina - Expositora 2 posters - coautora de 1 poster más
Argentina
Tipo de participación: Poster
Carga horaria: 40

JURADO/INTEGRANTE DE COMISIONES EVALUADORAS DE TRABAJOS ACADÉMICOS

Diseño e implementación de nuevas herramientas para la solubilización, evolución y cristalogénesis de proteínas (2014)

Candidato: M.Sc. Agustín Correa
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado
M. PAULINO , A. BUSCHIAZZO , P. AGUILAR , G. GONZÁLEZ , E. Laura Coitiño
Doctorado en Ciencias Biológicas / Sector Educación Superior/Público / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas / Uruguay
País: Uruguay
Idioma: Español
Tuores: Pedro Alzari y Pablo Opezzo

Múltiples - evaluación de posters Jornadas +Biofísica (2013)

Candidato: Varios
Tipo Jurado: Otras
E. Laura Coitiño
Posters en Jornadas +Biofísica / Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR / Uruguay
Sitio Web: masbiofísica.fcien.edu.uy
País: Uruguay
Idioma: Español
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica

Simulación de reactividad Química en Hemoproteínas (2002)

Candidato: Damián Scherlis Perel
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado
G. ESTIÚ , F. DOCTOROVICH , E. Laura Coitiño
Doctorado en Química / Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera / Universidad de Buenos Aires / Argentina
País: Argentina
Idioma: Español
Áreas de conocimiento:
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Químicas / Físico-Química, Ciencia de los Polímeros, Electroquímica / Química Computacional, hemoproteínas
Jurado de defensa final de tesis de Doctorado en Ciencias Químicas, especialidad Físicoquímica en

Información adicional

Trabajo desde 2015 en la elaboración conjunta ANEP-CFE con FCIEN, UdelaR en la propuesta de un posgrado de Especialización en Enseñanza integrativa de las Ciencias Naturales para Maestros, Profesores y graduados en Cs. Naturales de UdelaR.

Organización de eventos científicos:

2001-2003- Seminarios del Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias - Definición de una política de intercambio de avances de investigación entre las unidades del Instituto e implementación de las primeras instancias regulares durante el ejercicio de la Dirección del Instituto.

2002 - Setiembre - **XXVIIIth International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression** - Quito

2002, Montevideo, Uruguay - Integrante del Comité Organizador nacional

2013-Noviembre - 2das Jornadas +Biofísica- Chair de Mesa de Modelado Computacional y Simulaciones de Biomoléculas

2015-Noviembre - Latin American Crosstalk in Biophysics - Comité Organizador nacional y Chair de Mesa Computational Biophysics

2016-Noviembre - **XLIth International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression** - Quito

2016 - Montevideo, Uruguay - Co-Chair, Comité Organizador nacional, responsable de la coordinación de un taller internacional en "Computational Thermochemistry & Kinetics" sostenido durante el evento.

2017-Mayo - Primer Congreso Nacional de Biociencias - coordinación de simposios de la Seccional Biofísica SBF.uy

Indicadores de producción

PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA	211
Artículos publicados en revistas científicas	40
Completo	40
Trabajos en eventos	169
Libros y Capítulos	2
Libro publicado	2
PRODUCCIÓN TÉCNICA	13
Productos tecnológicos	9
Otros tipos	4
EVALUACIONES	27
Evaluación de proyectos	4
Evaluación de eventos	8
Evaluación de publicaciones	9
Evaluación de convocatorias concursables	3
Jurado de tesis	3
FORMACIÓN RRHH	62
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas	57
Tesis de maestría	5
Tesis/Monografía de grado	16
Tesis de doctorado	5
Otras tutorías/orientaciones	17
Iniciación a la investigación	12
Docente adscriptor/Practicantado	2
Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha	5
Tesis de doctorado	1
Docente adscriptor/Practicantado	3
Tesis de maestría	1

