



**SERGIO FABIAN PANTANO GUTIERREZ**

Dr.

[spantano@pasteur.edu.uy](mailto:spantano@pasteur.edu.uy)

Mataojo 2020, CP 11400,  
Montevideo, Uruguay  
+59825220910

**SNI**

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales

Categorización actual: Nivel II (Activo)

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

## Datos Generales

### INSTITUCIÓN PRINCIPAL

Institut Pasteur de Montevideo/ Institut Pasteur de Montevideo / Uruguay

### DIRECCIÓN INSTITUCIONAL

Institución: Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo / Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas  
Dirección: Calle Mataojo 2020 / 11400 / Montevideo, Montevideo, Uruguay  
Teléfono: (11400) 25220910 / 156  
Correo electrónico/Sitio Web: [spantano@pasteur.edu.uy](mailto:spantano@pasteur.edu.uy) [www.pasteur.edu.uy](http://www.pasteur.edu.uy)

## Formación

### Formación académica

#### CONCLUIDA

#### DOCTORADO

##### Doctor Philosophiae (1998 - 2001)

Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Trieste, Italia  
Título de la disertación/tesis: Theoretical Investigations on Ligand- and RNA-protein Complexes of Pharmaceutical Relevance  
Tutor/es: Paolo Carloni  
Obtención del título: 2001  
Institución financiadora: Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Trieste, Italia  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Biofísica Computacional

#### MAESTRÍA

##### Magister Philosophiae (1998 - 1999)

Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Trieste, Italia  
Título de la disertación/tesis: Molecular Target- Drug Interactions and Drug Resistance in Mycobacterium Tuberculosis: A First Principles Study  
Tutor/es: Paolo Carloni  
Obtención del título: 2000  
Institución financiadora: Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Trieste, Italia  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados / Biofísica Computacional

#### GRADO

##### Licenciatura en Física (1991 - 1996)

Universidad Nacional de San Luis, Argentina  
Título de la disertación/tesis: Transiciones conformacionales en Carragenanos: Efecto de mezcla de conformaciones poliméricas en la solución polielectrolítica  
Tutor/es: Julio Ciro Benegas  
Obtención del título: 1996  
Institución financiadora: Secretaría de Ciencia y Técnica, Fac. Cs. Fis. Mat y Nat. Univ. Nac. San Luis, Argentina  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

## Idiomas

### Español

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

### Inglés

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

### Italiano

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

## Áreas de actuación

### CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales

## Actuación profesional

### SECTOR ORGANIZACIONES PRIVADAS SIN FINES DE LUCRO/SOCIEDADES CIENTÍFICO-TECNOLÓGICAS - INSTITUT PASTEUR DE MONTEVIDEO - URUGUAY

Institut Pasteur de Montevideo

#### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

##### Funcionario/Empleado (07/2007 - a la fecha)

Investigador Principal ,60 horas semanales / Dedicación total  
Responsable del Grupo de Simulaciones Biomoleculares del IPMontevideo

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

#### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

##### Colaborador (05/2008 - a la fecha)

Investigador Grado 4 ,60 horas semanales  
Áreas Biología y Química

##### Colaborador (01/2007 - 04/2008)

Investigador Grado 3  
Área Biología

### SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ITALIA

Venetian Institute for Molecular Medicine

#### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

##### Otro (03/2004 - 08/2007)

Investigador Independiente ,45 horas semanales / Dedicación total

### SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/ENSEÑANZA SUPERIOR - ITALIA

Università degli Studi di Padova

#### VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (03/2006 - 06/2006)

Docente, Responsable de Curso de Doctorado ,10 horas semanales

Otro (03/2005 - 06/2005)

Docente, Responsable de Curso de Doctorado ,10 horas semanales

## ACTIVIDADES

### DOCENCIA

Doctorado en Física (03/2005 - 06/2006 )

Maestría

Asignaturas:

Theoretical Biophysics, Structure and Dynamics of Proteins and Nucleic Acids, horas

### SECTOR EXTRANJERO/INTERNACIONAL/OTROS - ITALIA

Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Trieste

## VÍNCULOS CON LA INSTITUCIÓN

Otro (09/2002 - 02/2004)

Investigador Independiente ,45 horas semanales / Dedicación total

### CARGA HORARIA

Carga horaria de docencia: Sin horas

Carga horaria de investigación: 30 horas

Carga horaria de formación RRHH: 30 horas

Carga horaria de extensión: Sin horas

Carga horaria de gestión: Sin horas

## Producción científica/tecnológica

La determinación estructural y el estudio de interacciones entre macromoléculas de interés biológico plantea importantes desafíos desde el punto de vista experimental debido a tendencia a la agregación, alta flexibilidad, dificultades en la purificación, imposibilidad de obtener cantidades de muestras necesarias, etc. La modelización computacional de sistemas moleculares provee una herramienta alternativa para estudiar la estructura, dinámica y energética de las interacciones que determinan el reconocimiento y la formación de complejos moleculares. Técnicas como la de dinámica molecular permiten obtener no solo información estructural detallada a nivel atómico sino también incluir efectos de la temperatura y registrar la evolución de un sistema a través de la coordenada temporal. Por otra parte las técnicas computacionales permiten modificar con relativa facilidad un gran número de condiciones experimentales distintas como temperatura, tamaño de la muestra, fuerza iónica, concentraciones, mutaciones puntuales, modificaciones post transcripcionales, muestrear enlace de distintos ligandos, etc. El grupo de Simulaciones Biomoleculares del Institut Pasteur de Montevideo se ocupa del estudio de interacciones entre moléculas de interés biomédico utilizando una variedad de herramientas de biofísica /bioquímica teóricas como simulaciones por dinámica molecular a resolución atómica y multiescala, modelización por homología y bioinformática. La utilización de estos métodos complementados con datos experimentales permite aportar nuevas perspectivas en el estudio y caracterización de sistemas biológicos.

Una parte importante del trabajo realizado por el grupo de Simulaciones Biomoleculares involucra el desarrollo de un campo de fuerza de grano grueso (Coarse Grain) denominado SIRAH ([www.sirahff.com](http://www.sirahff.com)). Esta iniciativa es in edita en Sudamérica y provee nuevas herramientas para abordar simulaciones en escalas espaciales y temporales verdaderamente comparables a las dimensiones de sistemas biológicamente relevantes.

## Producción bibliográfica

### ARTÍCULOS PUBLICADOS

## ARBITRADOS

### Revisiting the human polypeptide GalNAc-T1 and T13 paralogs (Completo, 2017)

FESTARI MARIA FLORENCIA, TRAJTENBERG FELIPE , BEROIS NORA, PANTANO S ,  
REVOREDO LESLIE , KONG Y, SOLARI-SAQUIERES P, NARIMATSU Y, FREIRE T, BAY S,  
ROBELLO, C, BÉNARD J, GERKEN TA, CLAUSEN H, OSINAGA E  
Glycobiology, v.: 2 p.:140 - 153, 2017  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 09596658  
DOI: [10.1093/glycob/cww111](https://doi.org/10.1093/glycob/cww111)  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

### SIRAH Tools: mapping, backmapping and visualization of coarse-grained models (Completo, 2016)

MACHADO MR , PANTANO S  
Bioinformatics (Oxford, England), v.: 32 10, p.:1568 - 1570, 2016  
Palabras clave: Coarse Grain Simulation SIRAH  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la  
Información y Bioinformática /  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 13674803  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

### The ataxia related G1107D mutation of the plasma membrane Ca<sup>2+</sup> ATPase isoform 3 affects its interplay with calmodulin and the autoinhibition process (Completo, 2016)

CALI T, FRIZZARIN M , LUONI L, ZONTA F, PANTANO S, CRUZ C, BONZA MC , BERTIPAGLIA I  
, RUZZENE M, DE MICHELIS MI, DAMIANO N, MARINO O, ZANNI G, ZANOTTI G, BRINI M,  
LOPREIATO R, CARAFOLI E  
Biochimica et biophysica acta. Molecular basis of disease, v.: 1863 1, p.:165 - 173, 2016  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 09254439  
DOI: [10.1016/j.bbadis.2016.09.007](https://doi.org/10.1016/j.bbadis.2016.09.007)  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

### Comparative analysis reveals amino acids critical for anticancer activity of peptide CIGB-552 (Completo, 2016)

ASTRADA S, GOMEZ Y, BARRERA E, OBAL G, PRITSCH OTTO , PANTANO S, VALLESPÍ MG,  
BOLLATI-FOGOLÍN M  
Journal of Peptide Science (E), v.: 11 12, p.:711 - 722, 2016  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 10991387  
DOI: [10.1002/psc.2934](https://doi.org/10.1002/psc.2934).

### SIRAH: a structurally unbiased coarse-grained force field for proteins with aqueous solvation and long-range electrostatics. (Completo, 2015)

DARRE L, MACHADO, MR , BRANDNER AF , GONZALEZ HC , FERRERIRA S, PANTANO S  
Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 11 p.:723 - 739, 2015  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la  
Información y Bioinformática /  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 15499618  
DOI: [10.1021/ct5007746](https://doi.org/10.1021/ct5007746)  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

### Identification of novel cyclic nucleotide binding proteins in Trypanosoma cruzi (Completo, 2015)

JAGER AV, DE GAUDIENZI JG , MILD JG , MC CORMACK B , PANTANO S, ALTSCHULER DA ,  
EDREIRA MM  
Molecular and Biochemical Parasitology, v.: 198 p.:104 - 112, 2015  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biología Celular, Microbiología /  
Medio de divulgación: Internet  
ISSN: 01666851

Scopus'

**Exploring LacI-DNA Dynamics by Multiscale Simulations Using the SIRAH Force Field (Completo, 2015)**

MACHADO, MR , PANTANO S

Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 11 p.:5012 - 5023, 2015

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 15499618

DOI: [10.1021/acs.jctc.5b00575](https://doi.org/10.1021/acs.jctc.5b00575)

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Reversible acetylation regulates Vascular Endothelial Growth Factor Receptor-2 activity (Completo, 2014)**

ZECCHIN A , PATTARINI L , GUTIERREZ MI , MANO M , MAI A , VALENTE S , MYERS MP , PANTANO S , GIACCA M

Journal of molecular cell biology, 2014

Palabras clave: acetylation angiogenesis p300

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Otros Tópicos Biológicos /

ISSN: 16742788

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Modeling and mutational analysis of Aspergillus nidulans UreA, a member of the subfamily of urea/H<sup>+</sup> transporters in fungi and plants (Completo, 2014)**

SANGUINETTI M. , AMILLIS S , PANTANO S , SCAZZOCCHIO C , RAMÓN A

Open Biology, v.: 4 6 , p.:140070 - 140070, 2014

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 20462441

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Surface localization of high-mobility group nucleosome-binding protein 2 (HMGN2) on leukemic B cells from chronic lymphocytic leukemia patients is related to secondary autoimmune hemolytic anemia (Completo, 2014)**

MORANDE PE , BORGE M , ABREU C , GALLETI J , ZANETTI SR , NANNINI P , BEZARES RF , PANTANO S , DIGHIERO G , OPPEZZO P , GAMBERALE R , GIORDANO M

Leukemia and Lymphoma, 2014

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 10428194

DOI: [10.3109/10428194.2014.957205](https://doi.org/10.3109/10428194.2014.957205)

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Genetic Bypass of Aspergillus nidulans crzA Function in Calcium Homeostasis (Completo, 2013)**

ALMEIDA RS , LOSS O , COLABARDINI AC , BROWN NA , BIGNELL E , SAVOLDI M , PANTANO S , GOLDMAN MH , ARST HN JR , GOLDMAN GH

G3: Genes | Genomes | Genetics , v.: 3 p.:1129 - 1141, 2013

Palabras clave: Aspergillus nidulan extragenic suppression calcineurin CrzA

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Micología /

ISSN: 21601836

Scopus' WEB OF SCIENCE™

**Evidence for a radial SNARE super-complex mediating neurotransmitter release at the Drosophila neuromuscular junction. (Completo, 2013)**

MEGIGHIAN A , ZORDAN M , PANTANO S , SCORZETO M , RIGONI M , ZANINI D , ROSSETTO A

Journal of Cell Science, v.: 126 p.:3134 - 3140, 2013

Palabras clave: Drosophila melanogaster SNARE Neuroexocytosis

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Otros Tópicos Biológicos /

ISSN: 00219533

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**The Blockade of the Neurotransmitter Release Apparatus by Botulinum Neurotoxins (Completo, 2013)**

PANTANO S, MONTECUCCO C  
Cellular and Molecular Life Sciences, 2013  
Palabras clave: Membrane fusion SNARE complex Clostridial neurotoxins  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Otros Tópicos Biológicos /  
ISSN: 1420682X  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Transferable Mixing of Atomistic and Coarse-Grain Water Models (Completo, 2013)**

PANTANO S, GONZALEZ HC, DARRE, L.  
Journal of Physical Chemistry B, 2013  
Palabras clave: Hybrid simulations  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la  
Información y Bioinformática /  
Escrito por invitación  
ISSN: 10895647

**Mutations in the basic loop of the Zn binuclear cluster of the UaY transcriptional activator suppress mutations in the dimerisation domain (Completo, 2012)**

CECCHETTO, G, RICHERO, M., OESTREICHER, N., MURO-PASTOR, M., PANTANO S,  
SCAZZOCCHIO, C.  
Fungal Genetics and Biology, v.: 49 9, p.:731 - 743, 2012  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biología Celular, Microbiología /  
ISSN: 10871845  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Breathing, bubbling, and bending: DNA flexibility from multimicrosecond simulations (Completo, 2012)**

ZEIDA, A, MACHADO, MR, DANS, PD, PANTANO S  
Physical Review E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, v.: 86 2, p.:21903 - 21903, 2012  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Otros Tópicos Biológicos /  
ISSN: 15393755  
Scopus® WEB OF SCIENCE™

**HIV-1 Tat Binding to PCAF Bromodomain: Structural Determinants from Computational Methods (Completo, 2012)**

PANTANO S, VO CQ, ROSSETTI, G., GIACCA, M., CARLONI P  
biology, v.: 1 p.:277 - 296, 2012  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Otros Tópicos Biológicos /  
ISSN: 20797737

**Advanced Computational Methods in Molecular Medicine (Resumen, 2012)**

GIORGETTI, A., RUGGERONE, P., PANTANO S, CARLONI P  
Journal of Biomedicine and Biotechnology, v.: 2012 p.:709085 - 709085, 2012  
Areas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /  
Escrito por invitación  
ISSN: 11107251  
Editorial

**Mixing Atomistic and Coarse Grain Solvation Models for MD Simulations: Let WT4 Handle the Bulk (Completo, 2012)**

DARRE L, TEK, A., BAADEN, M., PANTANO S

Journal of Chemical Theory and Computation, 2012

Areas de conocimiento:

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

ISSN: 15499618

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Molecular Dynamics Study of the Interaction of Arginine with Phosphatidylcholine and Phosphatidylethanolamine Bilayers (Completo, 2012)**

HERRERA F., BOUCHET, A., LAIRION, F., DI SALVO, EA, PANTANO S

The Journal of Physical Chemistry, v.: 116 p.:4476 - 4483, 2012

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

ISSN: 15205207

**Coarse grained models of water (Completo, 2012)**

L. DARRÉ, M. MACHADO, PANTANO S

WILEY Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science, 2012

Palabras clave: Coarse-grained Water models Modelado molecular

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Físicas / Física de los Materiales Condensados /

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 17590884

DOI: [10.1002/wcms.1097](https://doi.org/10.1002/wcms.1097)

<http://wires.wiley.com/WileyCDA/>

Scopus<sup>®</sup>

**Structure and dynamics of nano-sized raft-like domains on the plasma membrane. (Completo, 2012)**

HERRERA F, PANTANO S

Journal of Chemical Physics, v.: 136 1, p.:15103 - 15103, 2012

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Papel

ISSN: 00219606

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**A hybrid all-atom/coarse grain model for multiscale simulations of DNA (Completo, 2011)**

MACHADO, MR, DANS, PD, PANTANO S

Physical Chemistry Chemical Physics, v.: 13 40, p.:18134 - 18144, 2011

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica/química computacional, Simulaciones, Modelización

ISSN: 14639076

DOI: [10.1039/c1cp21248f](https://doi.org/10.1039/c1cp21248f)

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Isoform-specific determinants in the HP1 binding to histone 3: insights from molecular simulations. (Completo, 2010)**

MACHADO, MR, DANS, PD, PANTANO S

Amino Acids, v.: 38 5, p.:1571 - 1581, 2010

Palabras clave: Epigenetics, HIV-1, Transcription, Phosphorylation

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales Modelling

ISSN: 09394451

DOI: [10.1007/s00726-009-0371-3](https://doi.org/10.1007/s00726-009-0371-3)

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Subcellular localization of the interaction between the human immunodeficiency virus transactivator Tat and the nucleosome assembly protein 1. (Completo, 2010)**

DE MARCO, A, DANS, PD, KNEZEVICH, A, MAIURI, P, PANTANO S, MARCELLO, A

Amino Acids, v.: 38 5 , p.:1583 - 1593, 2010

Palabras clave: HIV - Chromatin - hNAP-1 - FRET

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Virologia,

Modelizacion molecular

ISSN: 09394451

DOI: [10.1007/s00726-009-0378-9](https://doi.org/10.1007/s00726-009-0378-9)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Arg206 of SNAP-25 is essential for neuroexocytosis at the Drosophila melanogaster neuromuscular junction (Completo, 2010)**

MEGIGHIAN A , SCORZETO M , RIGONI M , ZANINI D , PANTANO S , BENNA C , ROSSETTO O , MONTECUCCO C , ZORDAN M

Journal of Cell Science, 2010

Areas de conocimiento:

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

ISSN: 00219533

DOI: [10.1242/jcs.071316](https://doi.org/10.1242/jcs.071316)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**A Coarse Grained Model for Atomic-Detailed DNA Simulations with Explicit Electrostatics (Completo, 2010)**

DANS, PD , ZEIDA A , MACHADO, MR , PANTANO S

Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 6 5 , p.:1711 - 1725, 2010

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica/Bioquímica computacional, Simulaciones, Modelizacion

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

ISSN: 15499618

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Study of molecular dynamics in a tridimensional structure of kappa-carragenan in different solvents (Completo, 2010)**

GAUNA, CF , VILLEGAS, M , GUIDUGLI, S , ESTEBAN, C , PAOLETTI S , PANTANO S , BENEGAS JC

Revista Mexicana de Fisica, v.: 56 1 , p.:61 - 68, 2010

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

ISSN: 0035001X

Scopus® WEB OF SCIENCE™  

**Another Coarse Grain Model for Aqueous Solvation: WAT Four? (Completo, 2010)**

DARRE L , MACHADO, MR , DANS, PD , HERRERA F , PANTANO S

Journal of Chemical Theory and Computation, v.: 6 p.:3793 - 3804, 2010

Areas de conocimiento:

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

ISSN: 15499618

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Cloning, characterization and subcellular localization of a Trypanosoma cruzi argonaute protein defining a new subfamily distinctive of trypanosomatids (Completo, 2010)**

GRACIA SILVA, MR , TOSAR, JP , FRUGIER, M , PANTANO S , BONILLA, B , ESTEBAN, L , SERRA, E , ROVIRA, C , ROBELLO, C , CAYOTA, A

Gene, 2010

Areas de conocimiento:

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

ISSN: 03781119

DOI: [10.1016/j.gene.2010.06.012](https://doi.org/10.1016/j.gene.2010.06.012)

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Salt induced asymmetry in membrane simulations by partial restriction of ionic motion (Completo, 2009)**

HERRERA F. , PANTANO S



Journal of Chemical Physics, v.: 130 19 , p.:195105 - 195113, 2009

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /  
Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales Modelling

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00219606

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Multi-scale modeling of HIV-1 proteins (Completo, 2009)**

CARNEVALE V. , RAUGEI S. , NERI M. , PANTANO S. , MICHELETTI C. , CARLONI P

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 898 p.:97 - 105, 2009

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /  
Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales Modelling

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 01661280

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**A fully atomistic model of the Cx32 connexon (Completo, 2008)**

PANTANO S. , ZONTA F. , MAMMANO F

PLoS ONE, v.: 3 3 , p.:2614 - 2625, 2008

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /  
Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales Modelling

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 19326203

www.plosone.org

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**In silico description of fluorescent probes in vivo (Completo, 2008)**

PANTANO S

Journal of molecular graphics & modelling, 2008

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /  
Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales Modelling

ISSN: 10933263

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**The role of phosphorylation on the structure and dynamics of phospholamban: A model from molecular simulations (Completo, 2007)**

PANTANO S. , CARAFOLI E

Proteins: Structure, Function and Genetics, 2007

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /  
Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 08873585

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Catabolite Activator Protein in Aqueous Solution: A Molecular Simulation Study (Completo, 2007)**

BERRERA M. , PANTANO S. , CARLONI P

Journal of Chemical Physics, 2007

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /  
Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00219606

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Unitary permeability of gap junction channels to second messengers measured by FRET microscopy and dual whole-cell current recordings (Completo, 2007)**

HERNANDEZ VH. , BORTOLOZZI M. , PERTEGATO V. , BELTRAMELLO M. , GIARIN M. , ZACCOLO M. , PANTANO S. , MAMMANO F

Nature Methods, v.: 4 4 , p.:353 - 358, 2007

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /  
Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /  
Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales Biología Molecular

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 15487091

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Crystal structure of peach Pru p 3, the prototypic member of the family of plant non-specific lipid transfer protein pan-allergens (Completo, 2006)**

PASQUATO N , BERNI R , FOLLI C , FOLLONI S , CIANCI M , PANTANO S , HELLIWELL JR ,  
ZANOTTI G

Journal of Molecular Biology, v.: 365 3 , p.:684 - 694, 2006

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /  
Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00222836

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**A molecular model of the Vibrio cholerae cytolysin transmembrane pore (Completo, 2006)**

PANTANO S , MONTECUCCO C

Toxicon, v.: 47 12 , p.:35 - 40, 2006

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /  
Biofísica/Bioquímica Modelling

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00410101

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Insights on HIV-1 Tat : P/CAF bromodomain molecular recognition from in vivo experiments and molecular dynamics simulations (Completo, 2006)**

PANTANO S , MARCELLO A , FERRARI A , GAUDIOSI D , SABO A , PELLEGRINI V , BELTRAM F ,  
GIACCA M , CARLONI P

Proteins: Structure, Function and Genetics, v.: 62 4 , p.:1062 - 1073, 2006

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /  
Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales Biología Molecular

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 08873585

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**cAMP modulation of the cytoplasmic domain in the HCN2 channel investigated by molecular simulations (Completo, 2006)**

BERRERA M , PANTANO S , CARLONI P

Biophysical Journal, v.: 90 10 , p.:3428 - 3433, 2006

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /  
Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00063495

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE<sup>™</sup>

**Pathogenetic role of the deafness-related M34T mutation of Cx26 (Completo, 2006)**

BICEGO M , BELTRAMELLO M , CARELLA M , PIAZZA V , ZELANTE L , BUKAUSKAS FF , ARSLAN  
E , CAMA E , PANTANO S , BRUZZONE R , DANDREA P , MAMMANO F

Human Molecular Genetics, v.: 15 17 , p.:2569 - 2587, 2006

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /  
Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales Biología Molecular

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 09646906

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Comparative analysis of HIV-1 Tat variants (Completo, 2005)**

PANTANO S, CARLONI P

Proteins: Structure, Function and Genetics, v.: 58 3 , p.:638 - 643, 2005

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 08873585

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Human, Drosophila, and C-elegans TDP43: Nucleic acid binding properties and splicing regulatory function (Completo, 2005)**

AYALA YM, DAMBROGIO A, PANTANO S, BURATTI E, BRINDISI A, MARCHETTI C, ROMANO M, BARALLE FE

Journal of Molecular Biology, v.: 348 3 , p.:575 - 588, 2005

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales Biología Molecular

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00222836

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Molecular basis of the allosteric mechanism of cAMP in the regulatory PKA subunit (Completo, 2005)**

PANTANO S, ZACCOLO M, CARLONI P

Febs Letters, v.: 579 12 , p.:2679 - 2685, 2005

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00145793

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**SNARE complexes and neuroexocytosis: how many, how close? (Completo, 2005)**

MONTECUCCO C, SCHIAVO G, PANTANO S

Trends in Biochemical Sciences, v.: 30 p.:367 - 372, 2005

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Biofísica/Bioquímica Biología Molecular

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 09680004

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**Improvement of a FRET-based indicator for cAMP by linker design and stabilization of donor-acceptor interaction (Completo, 2005)**

LISSANDRON V, TERRIN A, COLLINI M, DALFONSO L, CHIRICO G, PANTANO S, ZACCOLO M

Journal of Molecular Biology, v.: 354 3 , p.:546 - 555, 2005

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Biofísica/Bioquímica Simulaciones Biología Molecular

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00222836

Scopus<sup>®</sup> WEB OF SCIENCE™

**A Model of the N-terminal Cyclin T1 based on FRET experiments (Completo, 2005)**

PANTANO S, PANTANO S, MARCELLO A, SABO A, PELLEGRINI V, FERRARI A, BELTRAM F, GIACCA M, CARLONI P

Journal of theoretical medicine (Print), v.: 6 2 , p.:73 - 79, 2005

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Biofísica/Bioquímica Modelling Biología Molecular

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 10273662

Scopus®

**Molecular dynamics simulations on HIV-1 Tat (Completo, 2004)**

PANTANO S, TYAGI M, GIACCA M, CARLONI P

European Biophysics Journal With Biophysics Letters, v.: 33 4 , p.:344 - 351, 2004

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales Biología Molecular

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 01757571

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**NADH interactions with WT- and S94A-acyl carrier protein reductase from Mycobacterium tuberculosis: an ab initio study (Completo, 2002)**

PANTANO S, ALBER F, LAMBA D, CARLONI P

Proteins: Structure, Function and Genetics, v.: 47 1 , p.:62 - 68, 2002

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 08873585

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Amino acid modification in the HIV-1 Tat basic domain: Insights from molecular dynamics and in vivo functional studies (Completo, 2002)**

PANTANO S, TYAGI M, GIACCA M, CARLONI P

Journal of Molecular Biology, v.: 318 5 , p.:1563 - 1574, 2002

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales Biología Molecular

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00222836

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Proton dynamics in an enzyme model substrate: an ab initio molecular dynamics study (Completo, 2000)**

PANTANO S, ALBER F, CARLONI P

Journal of Molecular Structure Theochem, v.: 530 1-2 , p.:177 - 181, 2000

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 01661280

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Polyelectrolytic Aspects of the Thermodynamics of Conformational Transitions: K-Carrageenan in Formamide (Completo, 1999)**

BENEGAS JC, PANTANO S, VETERE A, PAOLETTI S

Biopolymers, v.: 49 2 , p.:127 - 130, 1999

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Biofísica/Bioquímica Termodinámica Mecánica Estadística

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00063525

Scopus® WEB OF SCIENCE™

**Thermodynamics of the Conformational Transition of Biopolyelectrolytes: the Case of Specific Affinity of Counterions (Completo, 1999)**

PAOLETTI S, BENEGAS JC, PANTANO S, VETERE A

Biopolymers, v.: 50 7 , p.:705 - 719, 1999

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales /

Biofísica/Bioquímica Termodinámica Mecánica Estadística

Medio de divulgación: Otros

ISSN: 00063525

Scopus® WEB OF SCIENCE™

## NO ARBITRADOS

### **FRET biosensor uncovers cAMP nano-domains at $\beta$ -adrenergic targets that dictate precise tuning of cardiac contractility (Completo, 2017)**

SURDO NC, BERRERA, M, KOSCHINSKI A, BRESCIA M, MACHADO MR, CARR C, WRIGHT P, GORELIK J, MOROTTI S, GRANDI E, BERS DM, PANTANO S, ZACCOLO M

Nature Communications, 2017

Medio de divulgación: Internet

ISSN: 20411723

DOI: [10.1038/ncomms15031](https://doi.org/10.1038/ncomms15031)

## LIBROS

### **cAMP signalling ( Participación , 2015)**

PANTANO S, MACHADO, MR

Número de volúmenes: 1294

Edición: ,

Editorial: Humana Press, Hatfield

Tipo de publicación: Investigación

Referado

Escrito por invitación

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica /

Medio de divulgación: Internet

ISSN/ISBN: 1940 6029

Capítulos:

Structure-based, in-silico approaches for the development of novel cAMP FRET reporters

Organizadores:

Página inicial 41, Página final 58

### **Advances in Bioinformatics and Computational Biology ( Participación , 2013)**

PANTANO S, DANS, PD. , DARRE, L. , MACHADO, MR. , ZEIDA, A. , BRANDNER, AF.

Número de volúmenes: 8213

Edición: 1,

Editorial: Springer, Zurich

Tipo de publicación: Investigación

Referado

Palabras clave: Molecular dynamics nucleic acids simulations

Areas de conocimiento:

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

Información y Bioinformática /

Medio de divulgación: Otros

ISSN/ISBN:

Financiación/Cooperación:

Institut Pasteur de Montevideo / Otra, Uruguay

[http://link.springer.com/chapter/10.1007%2F978-3-319-02624-4\\_7](http://link.springer.com/chapter/10.1007%2F978-3-319-02624-4_7)

Capítulos:

Assessing the Accuracy of the SIRAH Force Field to Model DNA at Coarse Grain Level

Organizadores: J.C. Setubal and N.F. Almeida

Página inicial 71, Página final 81

### **Book of selected invited experts ICS-UNIDO. Drug Design and Discovery for Developing Countries International Conference. ( Participación , 2008)**

MACHADO M, PANTANO S

Número de volúmenes: 1

Edición: ,

Editorial: ICS-UNIDO, Trieste

Tipo de publicación: Divulgación

Referado

Escrito por invitación

Areas de conocimiento:

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

Medio de divulgación: Otros

ISSN/ISBN:

Capítulos:

Structural Characterization of a New Target Against HIV-1 Using Theoretical Methods

Organizadores: E. Megnassan, L. Owono Owono and S. Miertus

Página inicial 84, Página final 95

#### **Proceedings of the International School of Physics. ( Participación , 2007)**

PANTANO S , BERRERA, M , ANSELMINI, C , CARLONI P

Edición: ,

Editorial: Societa Italiana di Fisica, Varenna

Areas de conocimiento:

Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Biofisica/Bioquimica Modelling

Medio de divulgación: Otros

ISSN/ISBN:

Capítulos:

Voltage-gated Ion Channels Investigated by Molecular Dynamics and Bioinformatics

Organizadores: R.A. Broglia, L. Serrano and G. Tiana

Página inicial 332, Página final 336

## **Producción técnica**

### **PRODUCTOS**

#### **The SIRAH force field 2014 (2014)**

Software, Otra

PANTANO S , MACHADO, MR , BRANDNER AF , GONZALEZ HC , DARRE L , DANS, PD , ZEIDA, A

Parametros, Topologias y programas para realizar y analizar simulaciones de grano grueso

País: Uruguay

Disponibilidad: Irrestringida

Institución financiadora: Institut Pasteur de Montevideo

Palabras clave: Simulacion Dinamica Molecular

Areas de conocimiento:

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

www.sirahff.com

## **Evaluaciones**

### **JURADO DE TESIS**

#### **Doctorado ( 2012 / 2015 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis

Sector Extranjero/Internacional/Otros // , Uruguay

-Tesis Doctoral Sofia Horjales (PEDECIBA Biología). Director: Alejandro Buschiazzo.

Titulo:Biología Estructural de Protein Quinasas: Las Serin/Treonin-Quinasas de Leishmania.

Integrantes: Beatriz Garat, Sergio Pantano y Andrea Villarino, Diciembre 2015. -Tesis Doctoral

Roberto Carraro (Fac. Química UdelaR). Directora: Margot Paulino, Co-directores: Federico

Iribarne, Julio Battistoni. Titulo: Modelado y estudio de complejos de Ciclosporina A y compuestos

relacionados con una ciclofilina de Trypanosoma cruzi. Integrantes: Sergio Pantano, Hugo

Ceretto y Jacqueline Búa, Mayo 2013. -Tesis Doctoral Aline Katz (UdelaR-PEDECIBA Química).

Director: Oscar Ventura, Co-director: Alberto Podjarny Titulo: Estudio del movimiento del lazo

flexible WPD de la proteína tirosina fosfatasa humana PTP1B y los factores que lo influyen.

Integrantes: Sergio Pantano, Eric Westhof, Sep. 2012.

#### **Doctorado ( 2012 / 2015 )**

Jurado de mesa de evaluación de tesis  
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de San Luis , Argentina  
-Tesis Doctoral Exequiel Barrera (Bioquímica, Universidad Nacional de San Luis, Argentina).  
Directora: Ana María Rodríguez, Co-director: Daniel Enriz. Título: Diseño de péptidos y peptidomiméticos actuando como inhibidores de los agregados beta-amiloides. Integrantes: Sergio Pantano, Gustavo Appignanesi y Lucia Fuentes, Agosto 2015. - Tesis Doctoral Osvaldo Martin (Biología, Universidad Nacional de San Luis, Argentina). Director: Jorge Vila, Co-directora: Myriam Villegas. Título: Simulaciones de Monte Carlo Guiadas por Vínculos Derivados de los Desplazamientos Químicos. Integrantes: Igal Szeifer, Daniel Enriz y Sergio Pantano, Febrero 2012.

## Formación de RRHH

### TUTORÍAS CONCLUIDAS

#### POSGRADO

##### **DESARROLLO DE METODOLOGÍAS PARA EL ESTUDIO DE MODELOS SIMPLIFICADOS DE ADN-PROTEÍNA (2015)**

Tesis de maestría  
/ , Uruguay  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Astrid Brandner  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la Información y Bioinformática

##### **MODELADO MOLECULAR DE PROCESOS RELACIONADOS A LA TRANSCRIPCIÓN DEL VIRUS VIH-1 (2012)**

Tesis de doctorado  
/ , Uruguay  
Nombre del orientado: Matias Machado  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica/Bioquímica computacional, Simulaciones, Modelización

##### **DESARROLLO DE MÉTODOS PARA ACELERAR SIMULACIONES DE DINÁMICA MOLECULAR (2012)**

Tesis de doctorado  
/ , Uruguay  
Nombre del orientado: Leonardo Darre  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica/Bioquímica computacional, Simulaciones, Modelización

##### **Molecular Simulation Approaches to Proteins Structure and Dynamics and to Ligand Design (2006)**

Tesis de doctorado  
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Trieste , Italia  
Programa: Functional and Structural Genomics  
Nombre del orientado: Marco Berrera  
Medio de divulgación: Otros  
País/Idioma: Italia, Inglés  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales Modelling

#### GRADO

##### **Modelización estructural de la interacción entre proteína quinasa dependiente de AMPc (PKA) y la proteína de la cápsida del virus de la Hepatitis C (core) (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: Astrid Brandner  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica/química computacional, Simulaciones, Modelización

#### **Desarrollo de Modelos Simplificados para el Estudio de la Dinámica y Flexibilidad Intrínseca del ADN (2011)**

Tesis/Monografía de grado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR, Uruguay  
Programa: Licenciatura en Bioquímica  
Nombre del orientado: Ari Zeida  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica / Biofísica/química computacional, Simulaciones, Modelización

#### **Dinamica molecolare applicata allo studio dell'idratazione di molecole fluorescenti utilizzate nelle misure di permeabilità di canali ionici. (2006)**

Tesis/Monografía de grado  
Sector Extranjero/Internacional/Enseñanza superior / Università degli Studi di Padova, Italia  
Programa: Laurea triennale in Fisica  
Nombre del orientado: Mario Cammarota  
Medio de divulgación: Otros  
País/Idioma: Italia, Italiano  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales

#### **Modelizzazione strutturale e dinamica della connesina 32 (2005)**

Tesis/Monografía de grado  
Sector Extranjero/Internacional/Enseñanza superior / Università degli Studi di Padova, Italia  
Programa: Laurea triennale in Fisica  
Nombre del orientado: Paolo Panizzolo  
Medio de divulgación: Otros  
País/Idioma: Italia, Italiano  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Otras Ciencias Naturales / Otras Ciencias Naturales / Biofísica/Bioquímica Simulaciones Computacionales Modelling

### **OTRAS**

#### **Post doctorado Externo CONICET, Argentina (2010)**

Otras tutorías/orientaciones  
Sector Extranjero/Internacional/Enseñanza superior // , Uruguay  
Nombre del orientado: Fernando Herrera  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias Biológicas / Biofísica  
Concluida en Marzo 2010

### **TUTORÍAS EN MARCHA**

### **POSGRADO**

#### **Desarrollo in silico de sensores fluorescentes para diseccionar vías de señalización celular (2017)**

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: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Florencia Klein  
País/Idioma: Uruguay, Español



#### **Desarrollo de sensores FRET para la identificación simultánea de caminos de señalización redox y cAMP (2016)**

Tesis de doctorado  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Ciencias - UDeLaR ,  
Uruguay  
Programa: Maestría en Biotecnología  
Tipo de orientación: Cotutor en pie de igualdad  
Nombre del orientado: Florencia Sardi  
País/Idioma: Uruguay, Español

#### **Desarrollo y aplicación de modelado molecular coarse grain de lípidos (2015)**

Tesis de doctorado  
Sector Extranjero/Internacional/Otros / Universidad Nacional de San Luis , Argentina  
Programa: Doctorado en Biología Molecular  
Tipo de orientación: Asesor/Orientador  
Nombre del orientado: Ezequiel Frigini  
País/Idioma: Argentina, Español

#### **Ensamblado de complejos macromoleculares sobre el ADN (2012)**

Tesis de maestría  
Sector Extranjero/Internacional/Otros // , Uruguay  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Matias Machado  
País/Idioma: Uruguay, Español  
Áreas de conocimiento:  
Ciencias Naturales y Exactas / Ciencias de la Computación e Información / Ciencias de la  
Información y Bioinformática

#### **OTRAS**

#### **Estudios de los procesos de agregación beta-amiloide mediante técnicas de simulación simplificadas (2016)**

Orientación de posdoctorado  
Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-Tecnológicas / Institut  
Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo , Uruguay  
Tipo de orientación: Tutor único o principal  
Nombre del orientado: Exequiel Barrera  
País/Idioma: Uruguay, Español

## **Otros datos relevantes**

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

#### **Detalhamento molecular em nível atômico das interações do complexo humano TLR4-MD-2 em membranas biológicas: Influência do LPS, glicosilação e oligomerização (2017)**

Candidato: Carla Carvalho de Aguiar  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
BOGO JA , SOARES TA , PANTANO S  
Biología Celular e Molecular / Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera /  
Universidad Federal de Río Grande del Sur / Brasil  
País: Brasil  
Idioma: Portugués

#### **Biología Estructural de Protein Quinasas: Las Serin/Treonin-Quinasas de Leishmania (2015)**

Candidato: Sofia Horjales  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
GARAT B , VILLARINO A , PANTANO S  
PEDECIBA Biología / Sector Organizaciones Privadas sin Fines de Lucro/Sociedades Científico-  
Tecnológicas / Institut Pasteur de Montevideo / Institut Pasteur de Montevideo / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

#### **Diseño de péptidos y peptidomiméticos actuando como inhibidores de los agregados beta-amiloide (2015)**

Candidato: Exequiel Barrera

Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
APPIGNANESI G , FUENTES L , PANTANO S  
Doctorado en Biología Molecular / Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera /  
Universidad Nacional de San Luis / Argentina  
País: Argentina  
Idioma: Español

**Estudio Computacional de Reacciones Químicas Involucradas en el Proceso de Blanqueo de la Pulpa de Celulosa con Dioxido de Cloro (2013)**

Candidato: Kennet Irving  
Tipo Jurado: Trabajo de conclusión de curso de Grado  
PANTANO S  
Sector Educación Superior/Público / Universidad de la República / Facultad de Química - UDeLaR /  
Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

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

Candidato: Roberto Carraro  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
CERECETTO H , BUA J , PANTANO S  
Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad  
de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Español

**Simulaciones de Monte Carlo Guiadas por Vínculos Derivados de los Desplazamientos Químico (2012)**

Candidato: Osvaldo Martin  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
PANTANO S  
Doctorado en Biología Molecular / Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución Extranjera /  
Universidad Nacional de San Luis / Argentina  
País: Argentina  
Idioma: Español

**Study of the movement of the WPD flexible loop of human protein tyrosine phosphatase PTP1B and the factors that influence it (2011)**

Candidato: Aline Katz  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
PANTANO S  
Doctorado en Química (UDELAR-PEDECIBA) / Sector Educación Superior/Público / Universidad  
de la República / Facultad de Química - UDeLaR / Uruguay  
País: Uruguay  
Idioma: Inglés

**Molecular mechanics/coarse-grained hybrid model for investigating protein function (2007)**

Candidato: Marilisa Neri  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
SENO F , PANTANO S  
Physics and Chemistry of Biological Systems / Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución  
Extranjera / Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Trieste / Italia  
País: Italia  
Idioma: Inglés  
Sector of Statistical and Biological Physics

**Calmodulin flexibility and target recognition explored by molecular simulations (2006)**

Candidato: Giacomo Fiorin  
Tipo Jurado: Tesis de Doctorado  
KLEIN ML , PANTANO S  
Physics and Chemistry of Biological Systems / Sector Extranjero/Internacional/Otros / Institución  
Extranjera / Scuola Internazionale Superiore di Studi Avanzati, Trieste / Italia  
País: Italia  
Idioma: Inglés

## Información adicional

- Editor de la revista BBRC (Biochemical and Biophysical Research Communications) - Elsevier
- Investigador de Grado 4 de PEDECIBA, Area Biología, Subarea Biofísica
- Investigador de Grado 4 de PEDECIBA, Area Química.
- Investigador nivel II del Sistema Nacional de Investigadores - ANII - Uruguay
- Organizador del Curso y Workshop "Computational Modelling and Simulation of Biological Systems". Institut Pasteur de Montevideo 22 Feb. al 5 Marzo 2010.
- Organizador de la Conferencia "Molecular aspects of cell biology: A perspective from computational physics" International Centre for Theoretical Physics". Trieste, Italia. 11 al 15 de Octubre 2010. (24/07/2010)
- Organizador del Curso: Coarse Grain Methods for Biomolecular Simulations. Institut Pasteur de Montevideo 26 Sept. al 4 Oct. 2011.
- Coorganizador del Curso: Course and workshop Ion Channels: From Molecules to Pathology, Universidad de la República - Institut Pasteur de Montevideo. 24 Abril al 4 Marzo 2012.
- Organizador del Curso: NFS Workshop on Multiscale Modeling and Simulation. Institut Pasteur de Montevideo, 2-15 Sept. 2012 (25/03/2013)
- Organizador del Curso FOCEM "Introduction to Structural Biology and Bioinformatics", Institut Pasteur de Montevideo, Noviembre 2013.
- Organizador de la primera reunión sudamericana de Jefes de Grupos de Simulación Molecular. IP Montevideo, Mayo 2015.
- Organizador del curso internacional "OpenLab: Performing Molecular Simulations with the Sirah force field", IP Montevideo, Mayo 2015.
- Co-Organizador del Curso Internacional "VIII PostLATAM course Membrane Lipids, Transporters, Channels...and all that crosstalk", Salto, Uruguay. Nov. 2015.
- Co-Organizador de la reunión binacional "Joint meeting SAB/SBFUy "Latin American Crosstalk in Biophysics and Physiology", Salto, Uruguay. Nov. 2015.
- Co-Organizador del QUITEL 2016, 42do Congreso de Químicos Teóricos de Expresión Latina, Montevideo, Uruguay.
- Junior Member del International Centre for Theoretical Physics (ICTP), Trieste, Italia. (04/2002 al 09/2004) (13/04/2007)
- Revisor de revistas internacionales especializadas (PCCP, JACs, PLoS ONE, Proteins, Bioinformatics, JCTC, SciRep, etc.)

## Indicadores de producción

<b>PRODUCCIÓN BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>59</b>
<b>Artículos publicados en revistas científicas</b>	55
Completo	54
Resumen	1
<b>Libros y Capítulos</b>	4
Capítulos de libro publicado	4
<b>PRODUCCIÓN TÉCNICA</b>	<b>1</b>
<b>Productos tecnológicos</b>	1
<b>EVALUACIONES</b>	<b>2</b>
<b>Jurado de tesis</b>	2
<b>FORMACIÓN RRHH</b>	<b>14</b>
<b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones concluidas</b>	9
Tesis de doctorado	3
Otras tutorías/orientaciones	1

Tesis/Monografía de grado	4
Tesis de maestría	1
<b>Tutorías/Orientaciones/Supervisiones en marcha</b>	<b>5</b>
Tesis de maestría	2
Tesis de doctorado	2
Orientación de posdoctorado	1